王英华



晶体学导论

清华大学出版社

ISBN 7-302-00369-6

1G·2(课) 定价: 2.30 元

晶体学导论

王英华　编著

清华大学出版社

内 容 提 要

《晶体学导论》以简明的语言阐述了晶体的几何规律，介绍了点阵、对称、点群、空间群等概念以及典型的晶体结构及晶体学中常用的三种变换，即投影变换、倒易变换和坐标变换。

本书的基本特征是从材料科学工作者的角度去阐述晶体学问题，从而它避免了常规晶体学书籍中的冗长的推演，仅将清晰的物理概念呈现给读者。

本书可作为金属、陶瓷、半导体等材料专业的本科生、研究生教材和材料工作者的参考书，也可供生物、药物、高分子材料等方面的学生和工作者参考。

晶体学导论

王英华 编著

☆

清华大学出版社出版

北京 清华园

中国科学院印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行

☆

开本：850×1168 1/32 印张：9 5/8 字数：250 千字

1989 年 8 月第 1 版 1989 年 8 月第 1 次印刷

印数：0001－3000

ISBN 7-302-00369-6/TG·2(课)

定价：2.30 元

前　言

晶体几何学是多门学科的基础，它不仅对晶体结构测定者具有重要意义，而且对所有材料——金属、陶瓷、高分子、半导体、矿物、药物、生物等工作者，都具有重要的意义．可以说，了解晶体结构规律，掌握描述晶体的方法和语言，熟悉晶体学中所用的数学方法是材料工作者通晓本学科的基础和在本学科内得到发展的入门向导．

本书的对象是材料工作者，而不是晶体结构测定者．所以它不着重于历史的追述、点群、空间群理论的推导，而是着重于材料工作者应了解和熟悉的内容．书中前面介绍晶体内部结构的规律，对称特征，国际上通用的晶体学语言、符号和典型的晶体结构，后面着重讨论晶体学中常用的三种变换——投影变换、倒易变换、坐标变换和它们在材料科学中的应用．

本书在内容取舍上的特点是：对材料工作者常用的晶体学特有内容给以较大的篇幅，例如极射投影的概念与应用，与现代衍射技术密切相关的倒易点阵概念与应用等。对点群和空间群的处理不是着眼于来源推导，而是着眼于介绍国际通用符号的意义，国际资料的阅读，和从这些资料中能获得的材料结构特征，以帮助材料工作者在自己的研究工作中利用这些资料．同时，为了帮助初学者掌握书中的内容，文字力求通俗易懂，并在每章后附有思考与练习题．

本书可作为金属、陶瓷、半导体等材料专业本科生、研究生的教材和材料工作者的参考书，也可供生物、药物、高分子材料等方面的学生和工作者参考．

由于作者水平有限，写书只是基于发展我国科学文化的热情和对教育工作的感情，有错误和不妥之处，希望读者批评指正。

本书在编写过程中曾得到李恒德、张洪涛等教授的支持，张孝文教授在百忙之中对本书的初稿提出过宝贵的修改意见，在此一并表示感谢。

作　者

一九八六年九月于清华大学

目　　录

第一章　重复图形与点阵

一定的结构单元按一定的方式重复而成的图形称为重复图形．图 1-1 是二维重复图形，它的结构单元为图左下角方框内的花样，整个重复图形是由这一结构单元一个紧挨一个地构成．

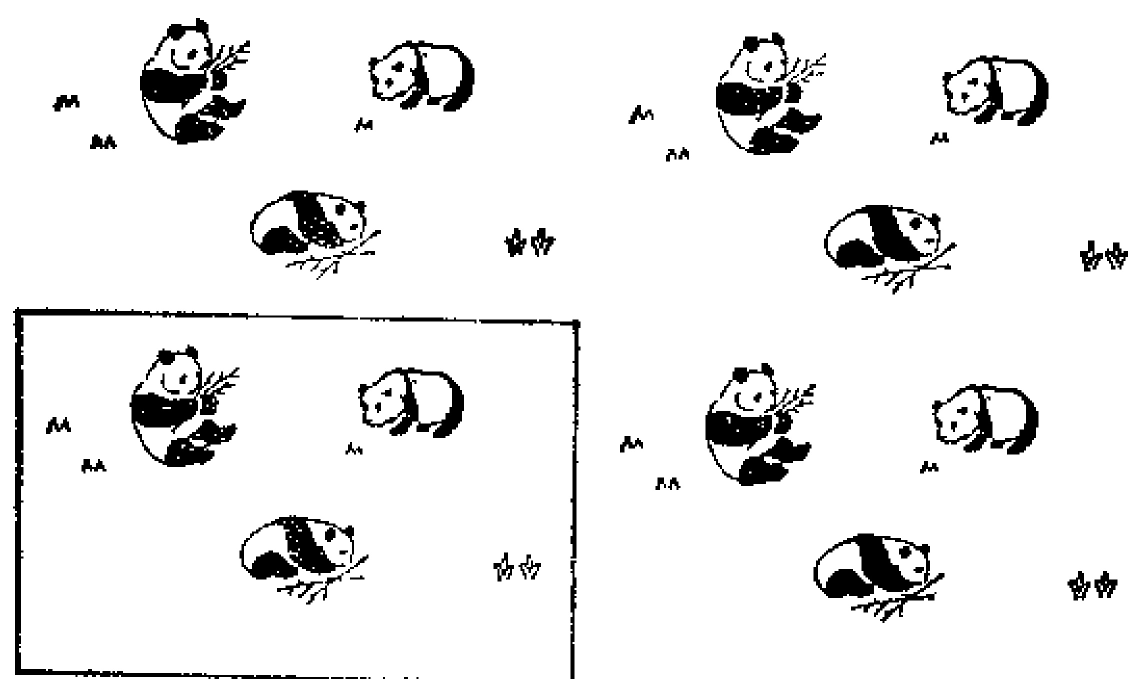


图 1-1　二维重复图形

晶体是三维重复图形，它的结构单元是由组成晶体的原子或原子团构成．

本章将从重复图形出发，讨论晶体内部结构的规律性，从而获得晶体学中的基本概念：点阵、阵胞和晶胞等．

一、重复图形与点阵

图 1-2 是一条花边，是一维重复图形．它是由图 1-3 所示的结构单元沿 a 方向一个挨一个地排列而成．为了表明重复图形的重复规律，在其中找一系列环境相同的点．所谓环境相同的点，是



图 1-2　一维重复图形



图 1-3　图 1-2 中的结构单元

指这些点周围的物理环境（周围的物质类型）和几何环境（与周围物质的配置关系）都相同．图 1-2 中的"●"点，彼此之间的环境都相同；"×"点，彼此之间的环境也相同．从图 1-2 中抽出一套环境相同的点，"●"或"×"，则形成如图 1-4 所示的点列，相邻两点之间的距离为 a．称此点列为重复图形图 1-2 的点阵．点阵就是重复图形中环境相同点的排列阵式．它仅是图形或物质排列规律的一种数学抽象，并没有具体的物质内容．点阵中的点称为阵点或结点．



图 1-4　一维点阵——点列

上面谈到，一维重复图形的重复规律可以用一维点阵——点列来描述．同样，二维重复图形的重复规律可以用二维点阵来描述．图 1-5 就是二维重复图形图 1-1 的点阵．

图 1-5　二维点阵——点网

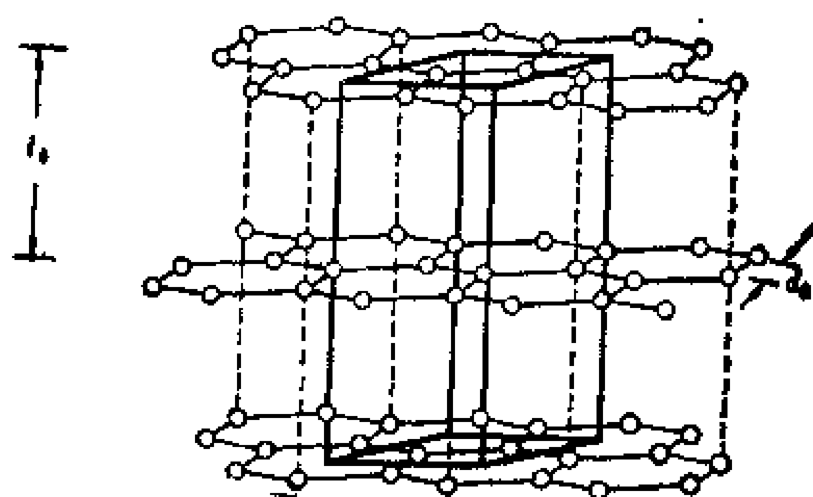


图 1-6　石墨的晶体结构与晶胞

一般情况下，晶体是三维重复图形．图 1-6 是石墨晶体的结构，它是由一层层的碳-碳六边形网面排列而成．各层之间间距相等，记为 l_0．如果把石墨晶体中的原子都投影到层面上，则奇数层上的碳原子相互重叠，如图 1-7 中的黑点所示．偶数层上的碳原子也相互重叠，如图 1-7 中的小圆圈所示．通常称像石墨层这样的排列方式为 $ABAB\cdots$ 排列．为考察石墨晶体的点阵，首先分析石墨层(图 1-8)的点阵．为此，在石墨层中寻找环境相同的点．

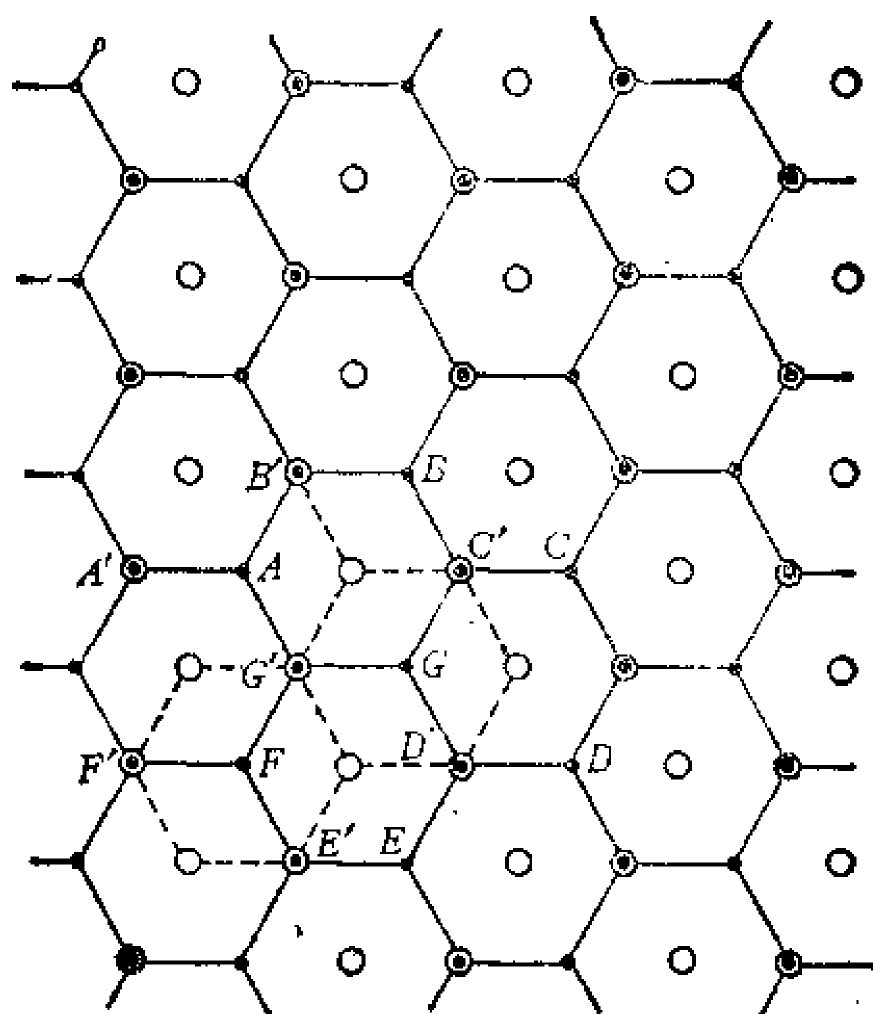


图 1-7 石墨晶体中的碳原子在石墨层面上的投影，图中"●"为奇数层上碳原子的投影位置；"○"为偶数层上碳原子的投影位置

观察图 1-8，发现 A、B、C、D、E、F···等处的原子环境相同，A'、B'、C'、D'、E'、F'···等处的原子环境也相同. 环境相同的点，不仅可以处在原子上，也可以处在图形中的任意位置，如图 1-8 中六角形的中心等. 因此，在图形中可以找到无穷多组环境相同的点，但任意抽取一组环境相同的点，都有如图 1-9 所示的形貌. 也就是说，图 1-9 是石墨层的点阵. 如果石墨层中原子之间的最小间距为 d_0（图 1-6），那么它的点阵中结点之间的最小间距为 $a_0 = 2d_0\cos 30°$. 现在再回过头来分析三维石墨晶体（图 1-6）和其在层面上的投影（图 1-7）. 现以图 1-7 中的奇数层为 $ABAB$···排列中的 A 层原子（"●"），偶数层为 $A'B'A'B'$···排列中的 B 层原子（"○"）. 考察图中 A、B 层中的碳原子，发现在

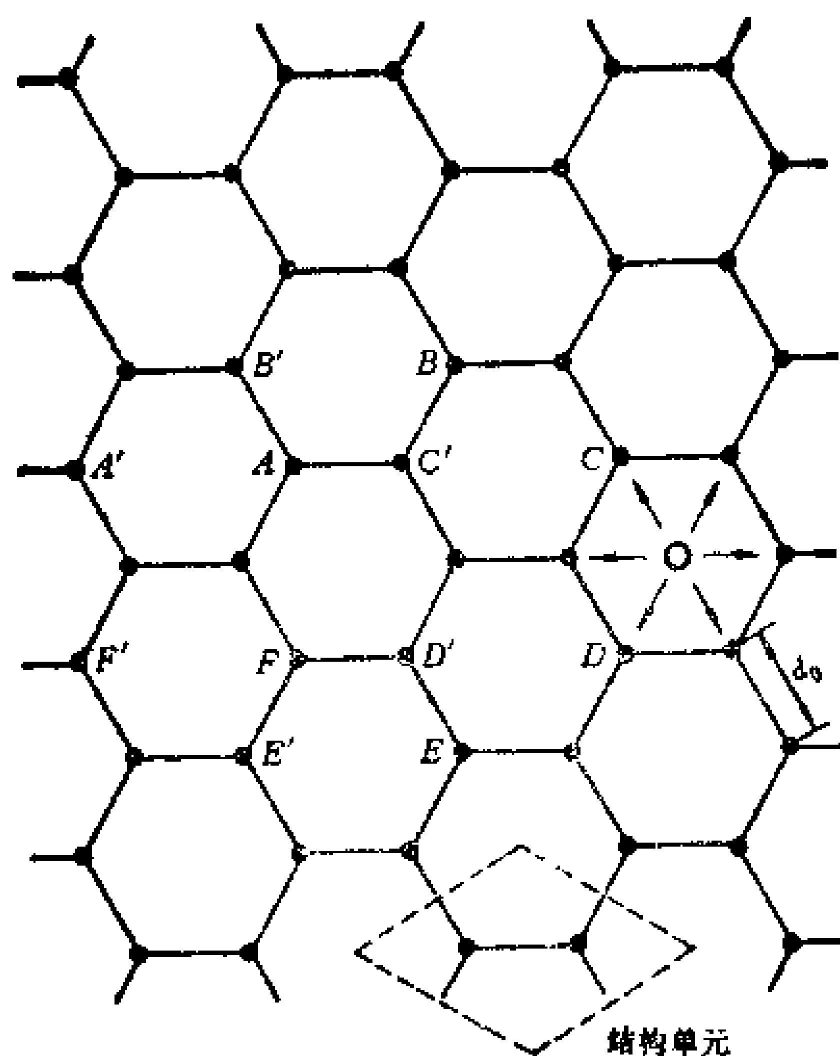


图 1-8　石墨层中的碳原子分布

层内环境相同的原子它们的空间环境并不相同，例如 A 层中 G 原子和 B 层中的 G' 原子就属于这种情况．因此，环境相同的点不可能同时处在 A 层和 B 层内．于是，对于石墨晶体来说，环境相同的点组是 A 层上的 A、B、C、D、E、F、G···或是 B 层上的 A'、B'、C'、D'、E'、F'、G'···等． 总之，石墨晶体的点阵在石墨层面上的投影与图 1-9 所示的石墨层片的点阵相同，只是晶体点阵的层间距为 $2l_0$．图 1-10 是石墨晶体的点阵．

比较图 1-10 所示的石墨晶体点阵和图 1-6 所示的石墨晶体结构，会发现可以取图 1-6 中所示的平行六面体为石墨晶体的结构单元，它与图 1-10 中的平行六面体相对应：结构单元中包含 4

图 1-9　石墨层的点阵

$c_0 = 2l_0$
$a_0 = 2d_0\cos30°$

图 1-10　石墨晶体的点阵

个碳原子。

金属的晶体结构一般都比较简单，金属氧化物，陶瓷等的晶体结构则较为复杂，有机晶体的结构就更为复杂，往往结构单元由多种元素的上百个原子组成。然而，不管晶体结构多么复杂，总可以

从其结构中抽象出比此结构简单得多的点阵，并由该点阵描述结构的重复规律.

二、平 移 矢

前面以画点的办法来描述点阵，这种办法在描述三维点阵时，极不方便. 所以常采用其他办法来描述点阵，矢量法就是其中之一. 矢量法就是采用矢量来描述点阵中各结点之间的相对位置，称任意两结点之间的矢量为平移矢. 对于一、二和三维点阵，都是先取点阵中某一结点为原点，再分别作一个矢量 $\boldsymbol{a}_0$，不在同一直线上的两个矢量 $\boldsymbol{a}_0$ 和 $\boldsymbol{b}_0$ 与不在同一平面中的三个矢量 $\boldsymbol{a}_0$、$\boldsymbol{b}_0$ 和 $\boldsymbol{c}_0$，使 $\boldsymbol{a}_0$、$\boldsymbol{b}_0$、$\boldsymbol{c}_0$ 整数倍的线性组合能表达点阵中所有结点的位置. 称这些矢量为初级平移矢，简称初级矢. 一对或一组初级平移矢称为初级矢群. 点阵中任意两结点之间的矢量为点阵的平移矢. 在图 1-11 所示的一维点阵中，原点为 0，初级矢为 $\boldsymbol{a}_0$，可以用下列矢量式描述点阵中任一结点的位置

$$\boldsymbol{r} = u\boldsymbol{a}_0 \tag{1-1}$$

式中 u 为整数，$\boldsymbol{r}$ 为平移矢.

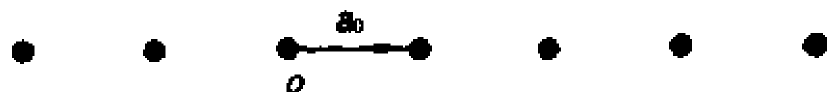


图 1-11 一维点阵的初级矢

在图 1-12 所示的二维点阵中，取 $\boldsymbol{a}_0$ 和 $\boldsymbol{b}_0$ 为初级矢，则其结点位置由下式描述

$$\boldsymbol{r} = u\boldsymbol{a}_0 + v\boldsymbol{b}_0 \tag{1-2}$$

式中 u、v 为整数，$\boldsymbol{r}$ 为平移矢.

图 1-10 所示的三维点阵中，$\boldsymbol{a}_0$、$\boldsymbol{b}_0$ 和 $\boldsymbol{c}_0$ 为初级矢群，其平移矢为

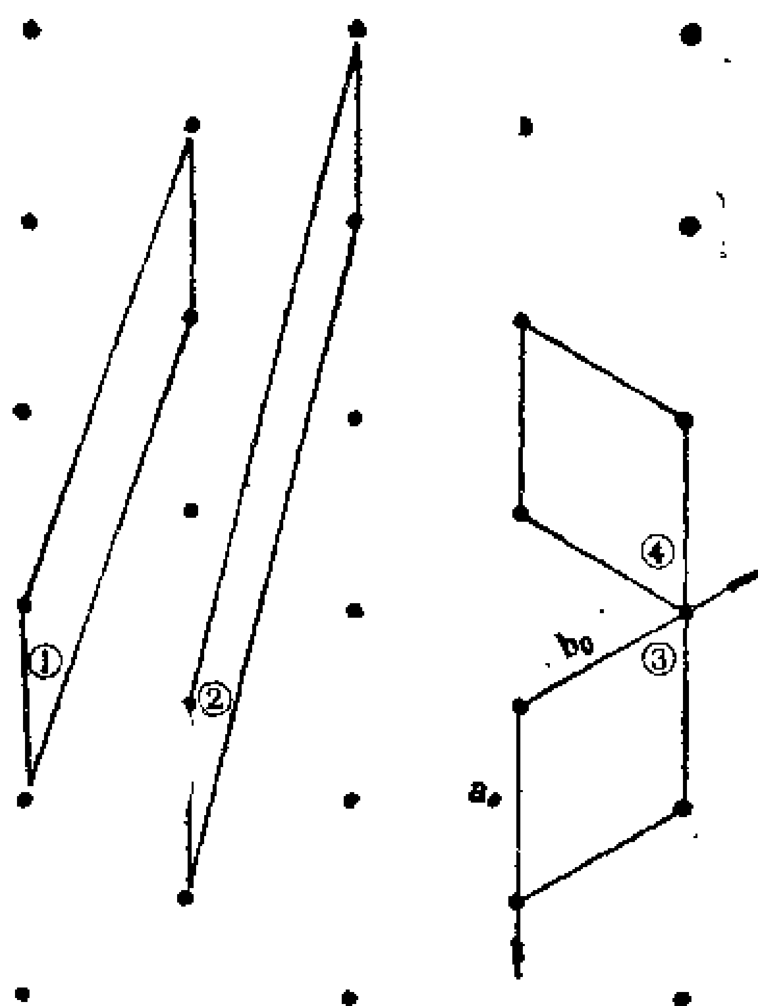


图 1-12　二维点阵中的初级矢群的几种取法

$$r = ua_0 + vb_0 + wc_0 \tag{1-3}$$

式中 u、v、w 为整数.

对于一维点阵，初级矢的取法是唯一的，对于二维和三维点阵，初级矢群的取法则是多种多样的．在图 1-12 所示的二维点阵中，画出了①、②、③、④组初级矢．这些初级矢的取法虽然不同，但是它们都有着共同的特点，即在以初级矢群为边棱的平行四边形或平行六面体中仅包含着一个结点．在图 1-13 所示的点阵中，第一对矢量为初级矢，以它们为边的平行四边形内所包含的结点数为 4×1/4=1，乘1/4 是因为处在四边形顶角上的结点为四个相邻的四边形所共有；第二对矢量则不是初级矢，因为以它们为边的

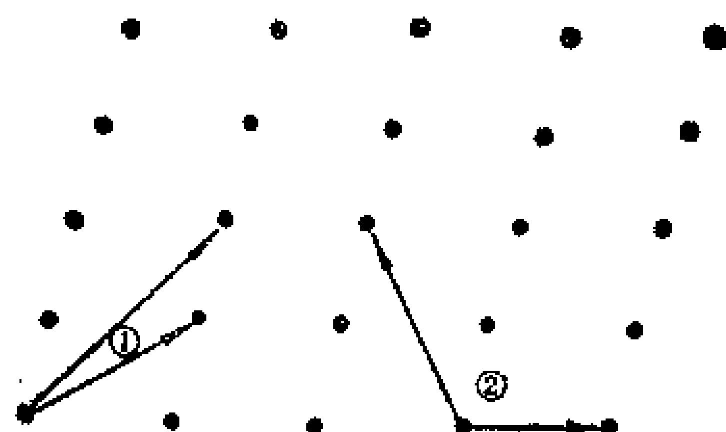


图1-13　初级矢群与非初级矢群

平行四边形中包含的结点数为 2. 因此，由矢量群所形成的形体中所包含的结点数目，就成为它们是否是初级矢群的判据.

三、阵　　胞

初级矢群虽然能给出点阵中所有结点的相对位置，但它们并不能直观地给出点阵的形貌. 为了弥补矢量法的这种不足，人们引入阵胞的概念. 所谓阵胞，就是以初级矢或特定的平移矢为边棱作成的平行四边形或平行六面体. 如图 1-14 中的粗实线所示.

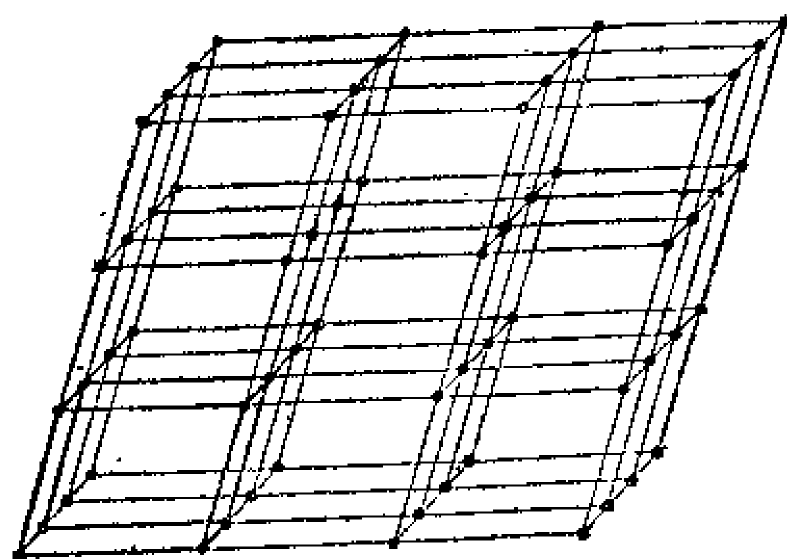


图1-14　点阵的阵胞与点阵

同时，图 1-14 也表示出整个点阵是由这样完全相同的阵胞密排堆积而成．阵胞是组成点阵的基本单元，从而研究晶体的点阵时，可以仅研究它的阵胞．

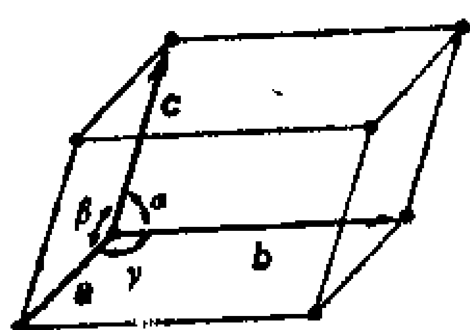


图 1-15　点阵参数 a、b、c 和 α、β、γ

在三维点阵中决定阵胞形状的有六个量，三个棱的长度 a、b、c 和它们之间的夹角 α、β、γ，称它们为点阵参数．它们之间的关系由图 1-15 表示．

由于点阵的初级矢群有不同的取法，所以点阵的阵胞也有不同的形态，图 1-16 是石墨点阵中的两种阵胞．这些阵胞的形态虽然不同，但都有着共同的体积，包含着相同的结点数，即一个结点．这种仅包含一个结点的阵胞称为初级阵胞或原胞．因此，初级阵胞或原胞是由初级矢群构成的．

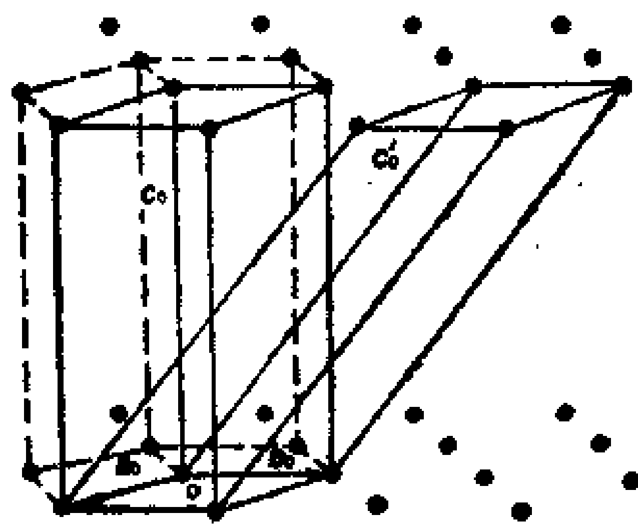


图 1-16　石墨晶体点阵中的初级矢群与阵胞

在晶体学中，通常希望阵胞的形状能反映出晶体的对称性．为此，有时阵胞的边棱不是由初级矢而是由平移矢构成，作为阵胞边棱的平移矢，称为基矢．由基矢构成的阵胞称为非初级阵胞或复胞，其所包含的结点数目大于 1．图 1-17 所示的正方形为平面复

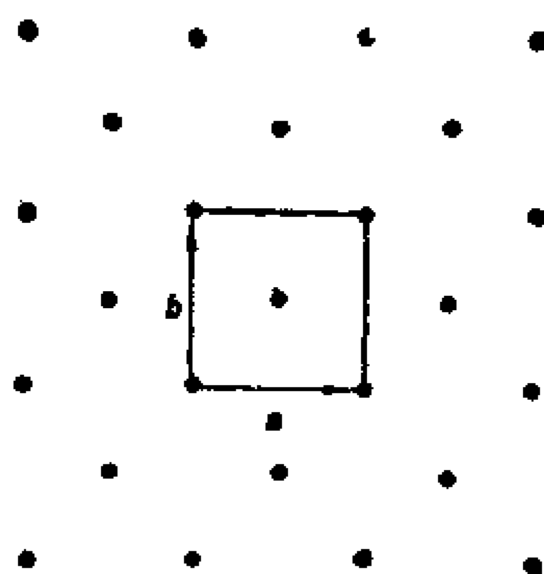


图 1-17　平面复胞

胞，它包含 2 个结点.

三维复胞有体心、底心和面心三种阵胞，分别记为 I、C 和 F，原胞记为 P，为简单阵胞. 这几种阵胞类型由图 1-18 所示.

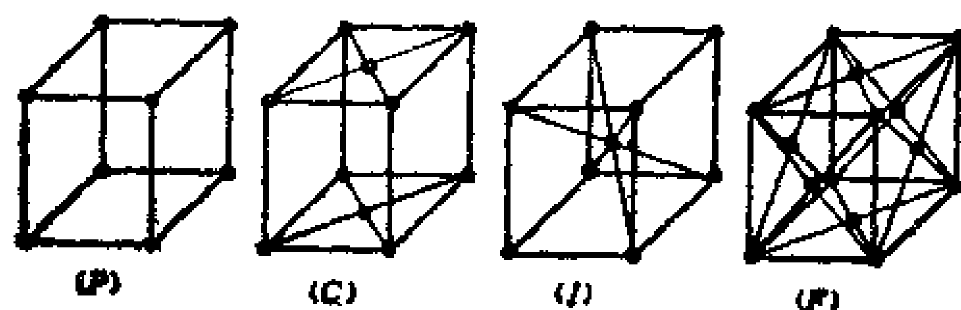


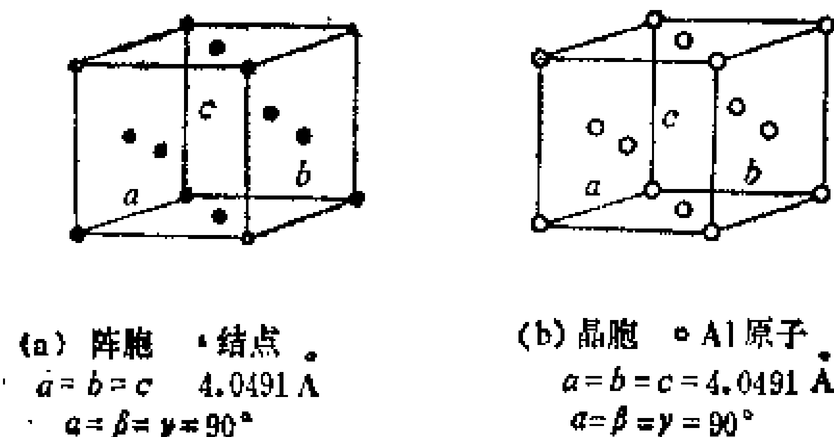
图 1-18　阵胞的类型

计算阵胞中包含的结点数目时，应注意到顶角处的结点由八个阵胞所共用，面上的结点为两个阵胞所共用. 复胞内包含的结点数目，等于此复胞体积与原胞体积之比.

虽然点阵阵胞的形态很多，但在选择其阵胞时，通常遵循如下的原则：三个棱尽量的短且相等；直角数尽量的多；考虑晶体的对称性. 例如对于石墨点阵的阵胞通常取图 1-16 中虚线所示的六棱柱体，它是由三个方位不同的简单阵胞组成.

四、点阵阵胞与结构晶胞

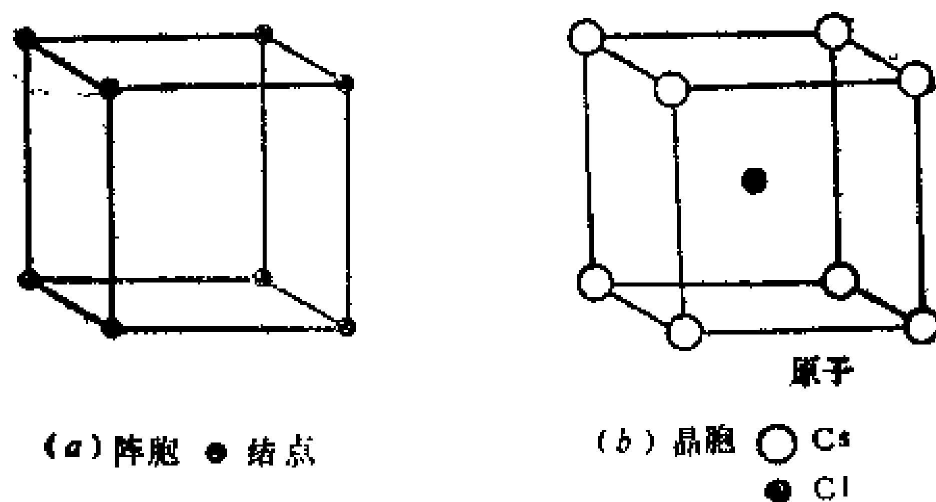
前面谈到，构成点阵的基本单元为阵胞；与此相似，构成晶体结构的基本单元，称之为结构的晶胞．某晶体的结构晶胞与其对应的点阵阵胞有相同的参数，即它们的形状与大小相同，只是各自所包含的物质内容不同．它们的参数统称为点阵参数．图 1-19 给出了铝晶体的阵胞与晶胞．



(a) 阵胞 •结点
$a=b=c$ 4.0491 Å
$\alpha=\beta=\gamma=90°$

(b) 晶胞 ○Al原子
$a=b=c=4.0491$ Å
$\alpha=\beta=\gamma=90°$

图 1-19 阵胞与晶胞



(a) 阵胞 ● 结点

(b) 晶胞 ○ Cs
● Cl

图 1-20 CsCl 的阵胞与晶胞

由于晶体点阵是从晶体结构中抽取出的结构重复规律，自然点阵中的每一个结点都与特定的结构单元——图 1-8 中给出了石

器层的结构单元——相结合，就会由晶体点阵转化为晶体结构。阵胞与晶胞之间的关系也是如此。例如将 Al 原子放在其阵胞的各个结点处就构成 Al 的晶胞(图 1-19)；将 Cs-Cl 原子对按一定方式放在 CsCl 晶体阵胞的各个结点处就构成了 CsCl 的晶胞（图 1-20)。

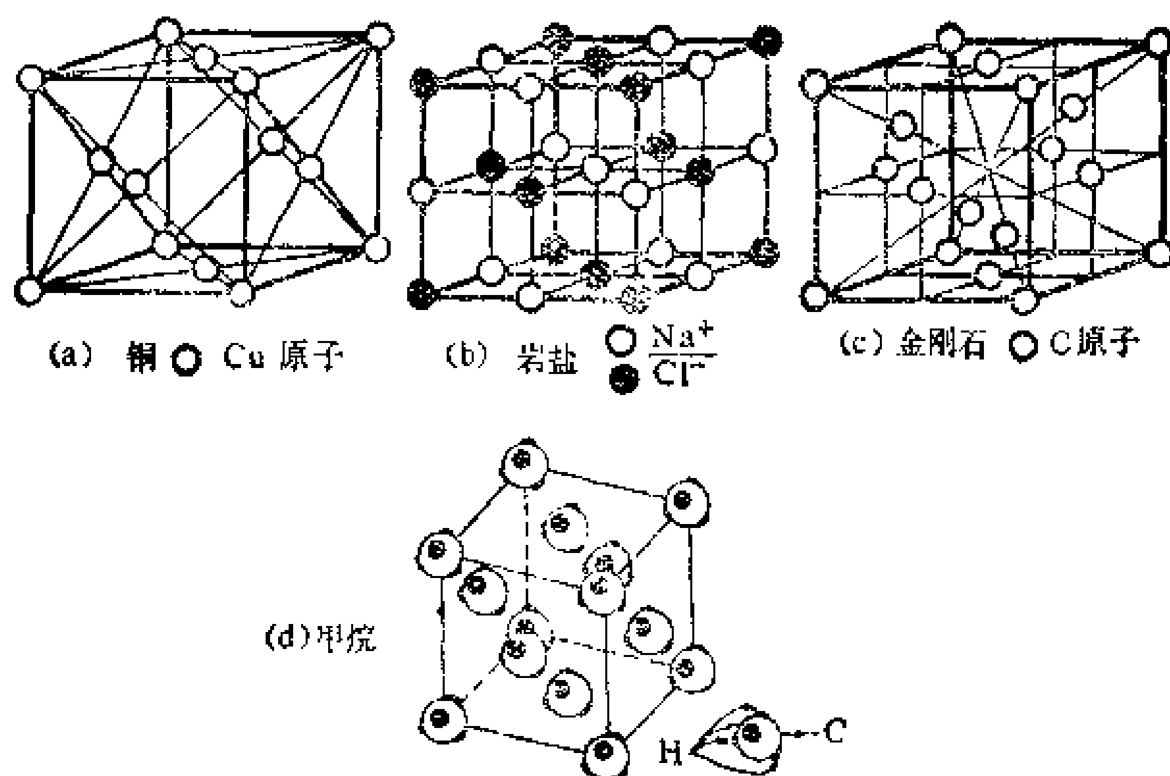


图 1-21 四种属于面心立方点阵的晶体

有些晶体，它们的晶体结构不同，即晶胞不同，但可以具有相似的阵胞。图 1-21 给出了 Cu、NaCl、金刚石和甲烷的晶胞，它们在晶体结构上差别很大，但是它们都具有面心立方点阵。因此，虽然自然界中存在的和人工制造的晶体品种极为繁多，结构千变万化，但是它们只能属于 14 种点阵。

练 习 题

1. 请在下图中画出四种不同的初级矢对.（图 1-22）

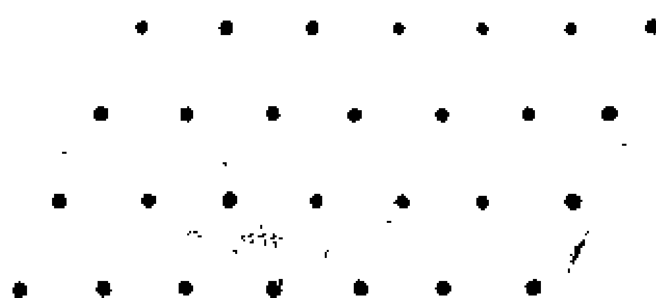


图 1-22 晶体点阵

2. 请说明下图中哪些是初级矢对.（图 1-23）

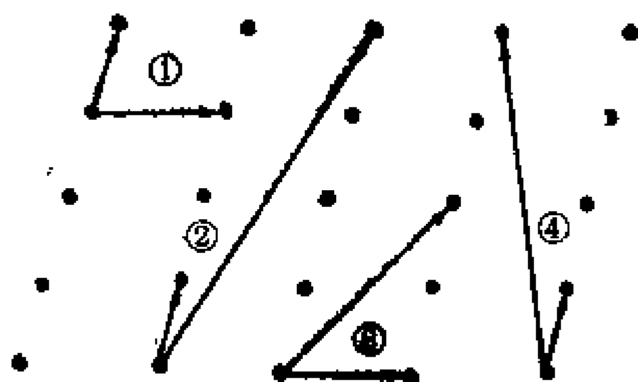


图 1-23 初级矢对与非初级矢对

3. 请写出图 1-24 中各平移矢的矢量式.

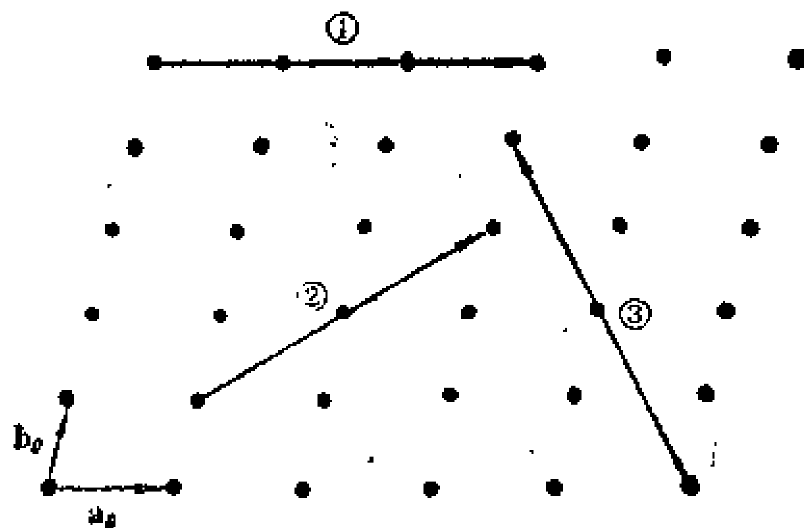


图 1-24 平移矢

4. 请计算体心和面心阵胞中所包含的结点数目。

5. 请在图 1-21 所示的几种晶体中画出结构单元。

6. 请根据图 1-25 所示的 Cu_2O 和 $CaTiO_3$ 晶胞判断它们属于何种点阵。

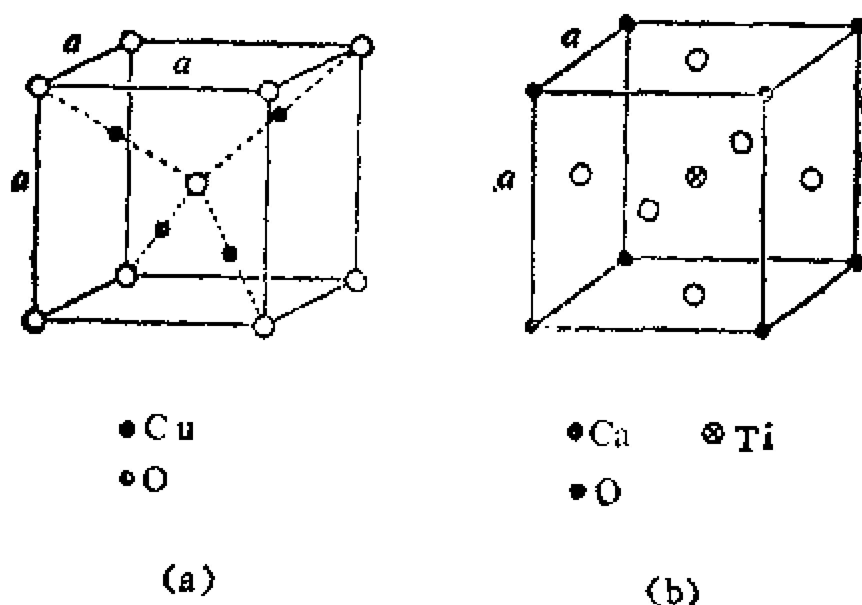


图 1-25 几种晶体的晶胞

(a) Cu_2O; (b) $CaTiO_3$

7. 请在图 1-26 所示的石墨结构中勾画出其结构晶胞，并给出它的阵胞。

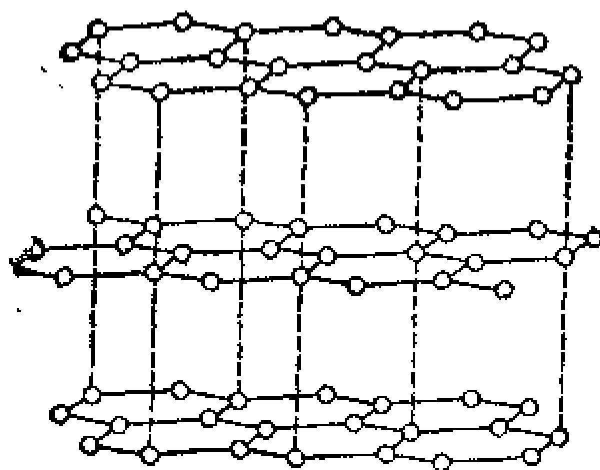


图 1-26 石墨的晶体结构

复 习 题

1. 请说明什么是点阵、结点、结构单元?

2. 请说明什么是初级矢,基矢,平移矢?

3. 请说明什么是阵胞、晶胞? 它们之间有什么关系?

4. 请说明什么是原胞、复胞?

第二章　晶体中的对称操作与对称元素

前面谈到，晶体结构是重复图形，点阵是其重复规律的描述。重复本身就是一种对称性，重复是平移对称性的表现。对称规律是晶体的基本规律之一。

晶体是对称图形，所谓对称图形是指图形中有若干完全相同的部分，并且它们之间由一定的动作相联系。晶体中的结构单元就是晶体结构中的相同部分，符合点阵规律的平移就是联系这些相同部分的动作。这种将对称图形中的相同部分联系起来的动作称为对称操作，对称操作所借助的几何元素——点、线、面为对称元素。

晶体这种对称图形中可能存在的对称操作和对称元素与一般对称图形中不同，晶体要受周期性重复图形这个基本规律的限制，即平移特性的限制。例如，在对称图形五角星中存在的对称操作，在一般的晶体中就不可能存在。

包括平移操作在内的对称操作称为微观对称操作，这种操作在讨论晶体结构时是比较重要的。由于晶体中平移量的数量级为几个埃，所以平移特性在晶体的宏观性质(物理、力学、电学等)中没有反映，因此，不包括平移操作的对称操作称为宏观对称操作。下面就分别讨论晶体中可能存在的宏观对称操作与微观对称操作。

一、宏观对称操作与对称元素

宏观对称操作时，图形中至少有一点固定不动，所以也称为点

操作。宏观对称操作包括旋转、反映、反演和旋转-反演四种。

（一）旋转操作与转轴

旋转操作是将图形绕固定轴旋转一定角度的操作，称此固定轴为转轴。也就是说，旋转操作所借助的对称元素为转轴。如果每次转动的旋转角为 α，则 $n=360°/\alpha$ 为转轴的轴次。图 2-1 是具有二次转轴的对称图形。Z 为二次轴，图形中的相同部分——红叶 A 绕 Z 轴旋转 180° 获得图形中的另一相同部分——红叶 B，而红叶 B 再绕 Z 轴转 180° 又达到红叶 A 的位置。整个对称图形不随旋转操作而改变。

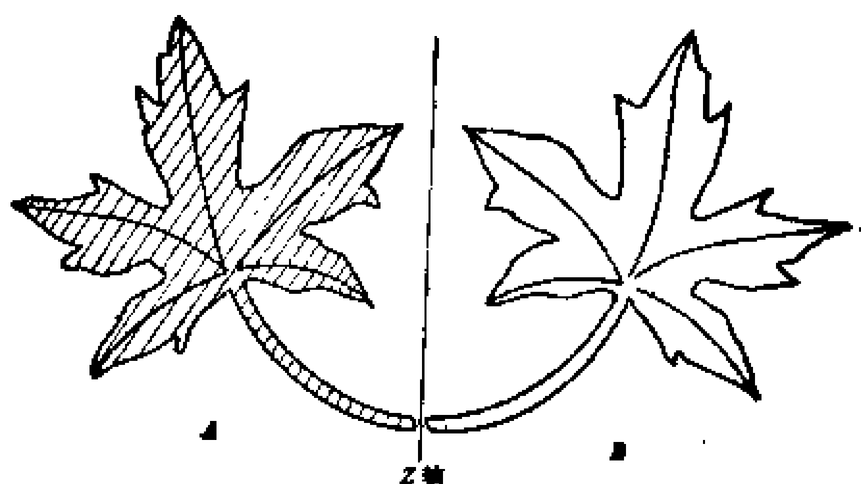


图 2-1　具有二次轴的对称图形

晶体中只能存在 1，2，3，4 和 6 次转轴。记为 1、2、3、4 和 6。也用图形 ⬮、▲、◆和⬢分别表示垂直于纸面的 2、3、4 和 6 次转轴。

晶体中只能存在 1、2、3、4 和 6 次转轴，是由晶体是重复图形这一基本规律决定的。考虑图 2-2 所示的二维点阵，其在 a 方向的初级矢长度为 a。设图形具有过结点垂直于纸面的 n 次轴，则过 A_1 点之轴将 A_1 点操作到 B_2 处，过 A_2 点之轴将点 A_1 操作到 B_1 处。由对称操作的定义可知，B_1 与 B_2 仍为点阵中的结点。即

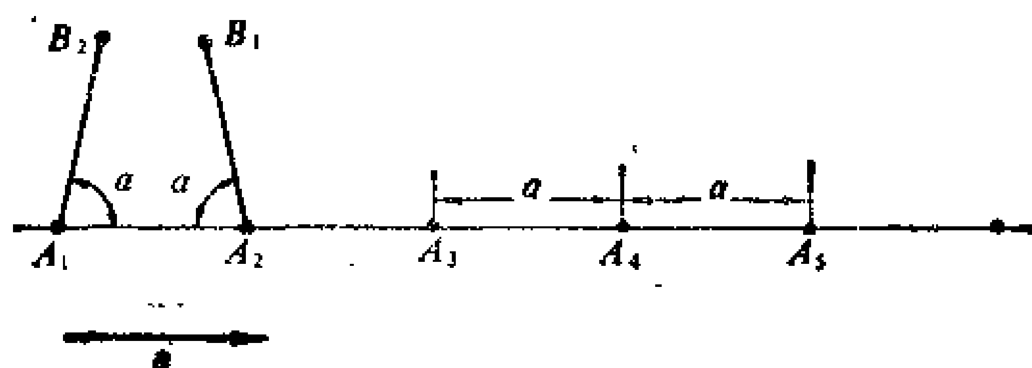


图 2-2 晶体中可能存在转轴轴次的证明

B_1 与 B_2 之间的距离应为初级矢长度 a 的整数倍.设 $\overline{B_1B_2}=Na$,从图中可以看出 $\overline{B_1B_2}=a-2a\cos\alpha$,因此 α 角的限制式为

$$\cos\alpha=-\frac{N-1}{2}$$

其中N为整数,并且 $-1\leqslant-(N-1)/2\leqslant1$. N的可取值,及由其决定的 α 角和对应的转轴轴次列于表 2-1。

从表 2-1 看出,晶体中只可能存在 1、2、3、4 和 6 次轴,而不可能存在 5、7 和更高次的转轴.[注]

表 2-1 晶体中可能存在的转轴轴次

N值	3	2	1	0	-1
$\cos\alpha$	-1	$-\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$	1
α值	180°	120°	90°	60°	360°
轴次n	2	3	4	6	1

如果转轴和 O-XYZ 坐标中的 Z 轴方向一致,设旋转操作前后各对应点的坐标为 x、y、z 和 x'、y'、z',那么它们之间的变换关系为

$$x'=x\cos\left(\frac{2\pi}{n}\right)-y\sin\left(\frac{2\pi}{n}\right)$$

注:目前发现准晶中存在这种轴次。

$$y' = x\sin\left(\frac{2\pi}{n}\right) + y\cos\left(\frac{2\pi}{n}\right)$$

$$z' = z$$

即变换矩阵为

$$\begin{bmatrix} \cos\left(\frac{2\pi}{n}\right) & -\sin\left(\frac{2\pi}{n}\right) & 0 \\ \sin\left(\frac{2\pi}{n}\right) & \cos\left(\frac{2\pi}{n}\right) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

（二）反映操作与对称面

反映操作是以固定平面为镜面，使对称图形的两部分互为镜像的操作。称此固定的平面为对称面或镜面，记为 m。人的左右手之间具有反映对称关系。图 2-3 中的熊猫 A 与 B 互为镜像，它们之间也存在反映对称关系。

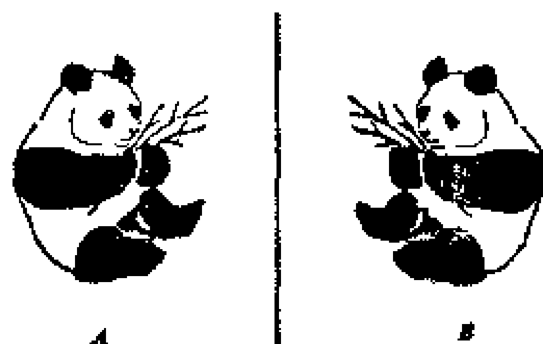


图 2-3　具有对称面的对称图形

如果以 XOZ 为对称面，操作前后对应点的坐标是 x、y、z 和 x'、y'、z' 则有

$$x' = x$$

$$y' = -y$$

$$z' = z$$

即有变换矩阵

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

（三）反演操作与对称心

图 2-4 为可进行反演操作的图形。图形由 A、B 两个相同的

部分组成，两部分中任何一对相应点（如 a 与 b）的连线都通过 o 点，并且与 o 等距，如 $ao = ob$. o 点为该图形的对称心，记为 i，它是操作过程中的不动点。如果以对称心为坐标原点，则反演操作所联系的对应点的坐标为

$$x' = -x$$
$$y' = -y$$
$$z' = -z$$

即有变换矩阵

$$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

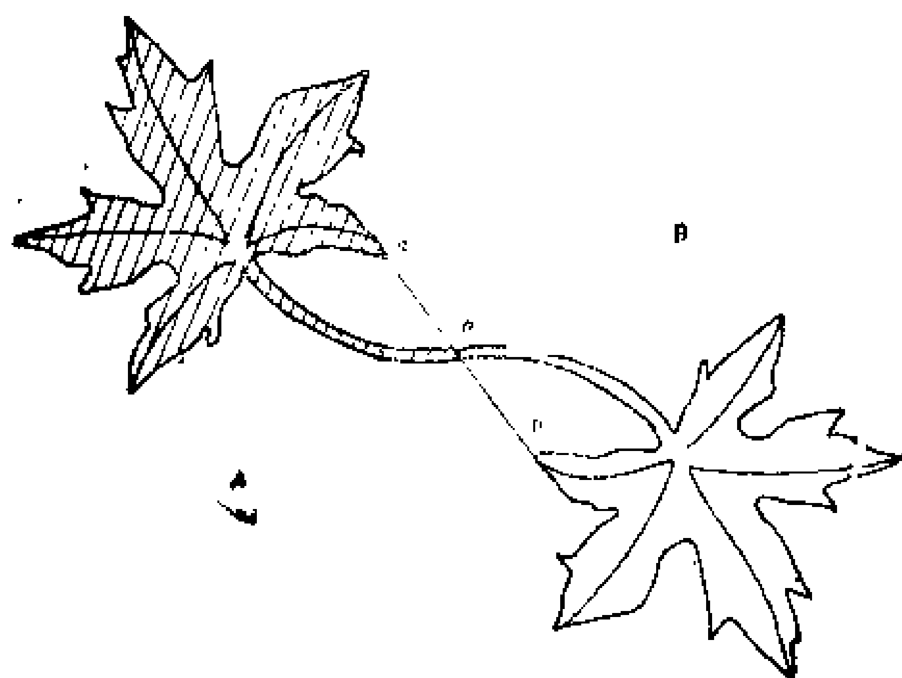


图 2-4　具有对称心的对称图形

（四）旋转-反演操作与反演轴

旋转-反演操作是先绕转轴旋转，再以轴上一点为心进行反演的复合操作。旋转-反演操作所借助的轴，称为反演轴或反轴。相应于 1、2、3、4 和 6 次轴，有轴次相同的反演轴，记为 $\bar{1}$、$\bar{2}$、$\bar{3}$、$\bar{4}$

和 $\bar{6}$。其中 $\bar{1}$ 与对称心 i 等价，$\bar{2}$ 与其垂直的对称面等价，$\bar{3}$、$\bar{6}$ 分别与 $3+i$ 和 $3+m$ 等价，此处的"+"号表示两个操作同时对图形起作用，也就是说，对称图形中同时存在由"+"号所联系的两种对称元素。因此，只有 $\bar{4}$ 是独立的。

现以图 2-5 所示的具有四次反轴的对称图形为例，说明旋转-反演操作的含意。图中的四个小旗分别标记上 1、2、3、4。它们都是一面为深色，一面为浅色。整个图形的操作过程为：先将小旗 1 绕反轴 $\bar{4}$ 反时针旋转 90° 到达 1′ 的位置（图中以虚线所示），1′ 经在反轴 $\bar{4}$ 上的对称心 i 反演，到达小旗 2 的位置；对小旗 2 进行同样的操作，到达小旗 3 的位置，继而到达小旗 4…的位置。值得注意的是，小旗 1′ 只是对称操作过程中的过渡位置，它不是对称图形的组成部分。

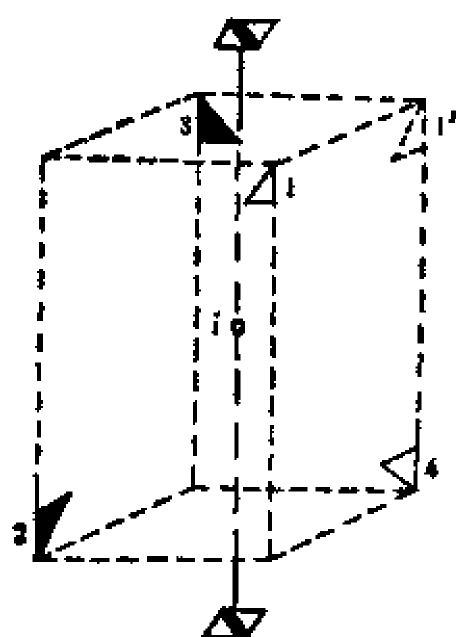


图 2-5　具有四次反轴的对称图形

旋转-反演的变换矩阵为旋转变换矩阵与反演变换矩阵的乘积，即：

$$
\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}
\begin{bmatrix} \cos\left(\frac{2\pi}{n}\right) & -\sin\left(\frac{2\pi}{n}\right) & 0 \\ \sin\left(\frac{2\pi}{n}\right) & \cos\left(\frac{2\pi}{n}\right) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}
$$

$$
= \begin{bmatrix} -\cos\left(\frac{2\pi}{n}\right) & \sin\left(\frac{2\pi}{n}\right) & 0 \\ -\sin\left(\frac{2\pi}{n}\right) & -\cos\left(\frac{2\pi}{n}\right) & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}
$$

（五）宏观对称元素小结

下面以表 2-2 小结宏观对称操作与对称元素。其中操作类型中的第一类是指操作前后坐标系没有左、右旋变化的操作；第二类是指操作前后有左、右旋变化的操作。从表中可以看出，独立的宏观对称元素只有 1、2、3、4、6、m、i 和 $\bar{4}$，共 8 个。

表 2-2　宏观对称元素一览表

操作类型	操作名称与性质		对称元素		
			名称	书写符号	图形符号
第一类	旋转操作：绕定轴多次转动，每次转 α 角，直到图形完全重复.	360°	一次转轴	1	
		180°	二次转轴	2	
		120°	三次转轴	3	
		90°	四次转轴	4	
		60°	六次转轴	6	
第二类	旋转反演操作：先旋转再反演，反复操作，直到图形完全重复.	360°	一次反轴	$\bar{1}$	
		180°	二次反轴	$\bar{2}=m$	
		120°	三次反轴	$\bar{3}=3+\bar{1}$	
		90°	四次反轴	$\bar{4}$	
		60°	六次反轴	$\bar{6}=3+m$	
	反映操作		对称面	m	
	反演操作		对称心	$\bar{1}$	

二、微观对称操作与对称元素

微观对称操作有平移，旋转-平移和滑动-平移三种，它们相应的对称元素分别为平移轴，螺旋轴和滑动面。

（一）平移操作与平移轴

平移操作是指单位图形沿一定方向按一定周期 t 无限平行移动的操作。如图 2-6 所示。操作时所沿的一定方向称为平移轴。

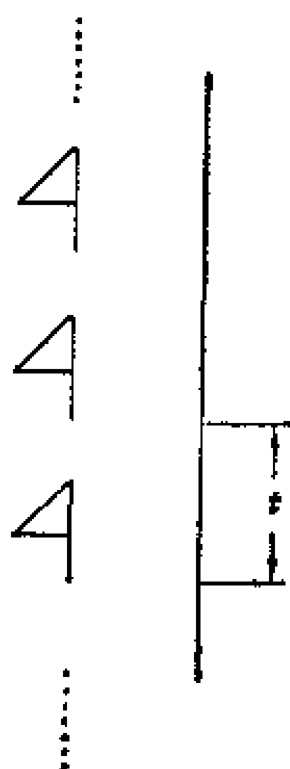
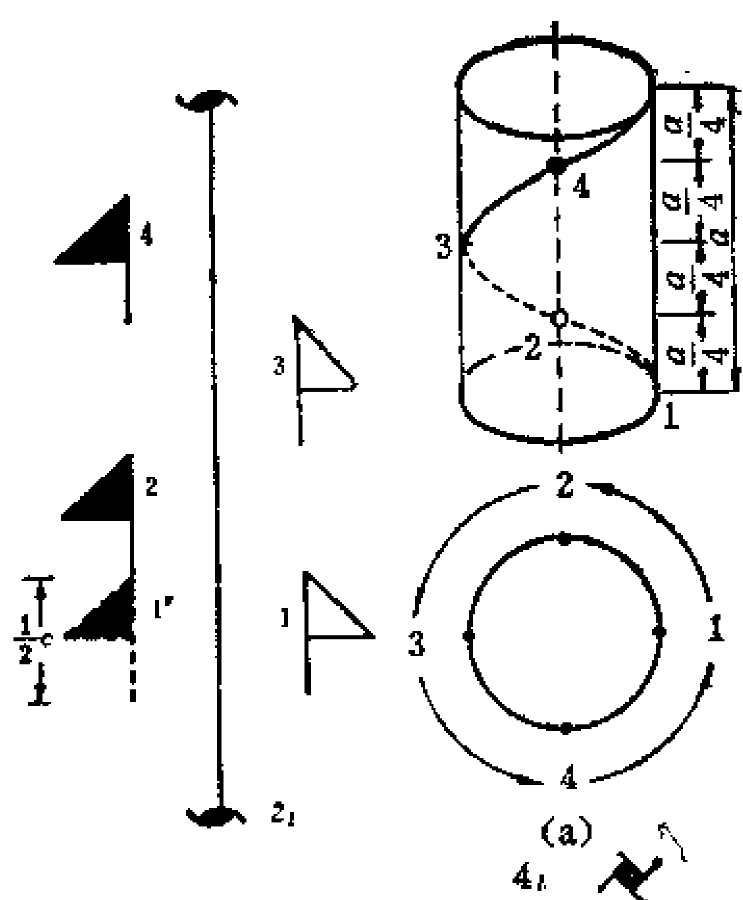


图 2-6　具有平移轴的部分对称图形

（二）旋转-平移操作与螺旋轴

旋转-平移操作是先绕 n 次对称轴旋转一定角度，再将转动后的图形沿此轴平移一定距离的复合操作。操作所借助的轴称为螺旋轴。相应于 2、3、4、6 次转轴，有 2_1、3_1、3_2、4_1、4_2、4_3、6_1、6_2、6_3、6_4 和 6_5 螺旋轴。其中数字本身表示螺旋轴的轴次，轴次与其

右下角的字标共同表明旋转操作后沿平移轴移动的量。例如图2-7中晶胞的 c 轴平行于 2_1 螺旋轴，它表明先将小旗1右旋 180°，成小旗1′，再将1′沿 c 方向平移 $(1/2)c$，到小旗2的位置，如此重复动作，形成具有 2_1 螺旋轴的对称图形，它是由小旗1、2、3、4…组成。图 2-8(a) 和 (b) 分别表示具有 4_1 和 4_3 螺旋轴的对称图形，4_1 表示点1反时针转 90° 后再沿 a 轴上升 $(1/4)a$ 到达点2的位置，点2再重复上述动作到达点3处，如此继续下去，形成整个对称图形。图 2-8(a) 中只取了一个单位基矢长度 a 内的图形。4_3 表示，将点1反时针转 90° 后，上升 $(3/4)a$ 到达点4处，重复操作在图形上方 $2a$、$3a$ 内得到点3和点2相应的位置。根据点阵的平移特性，得到单位基矢长度内的对称图形图 2-8(b)。



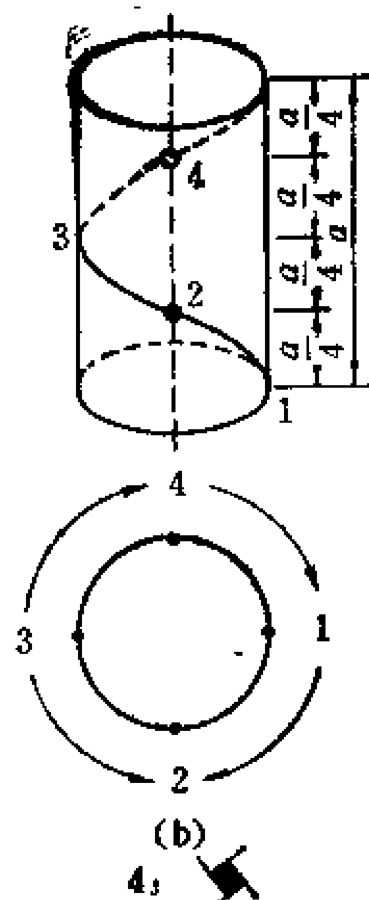


图 2-7　具有 2_1 螺旋轴的部分对称图形

图 2-8　旋转-平移
(a) 右旋 4_1；(b) 左旋 4_3

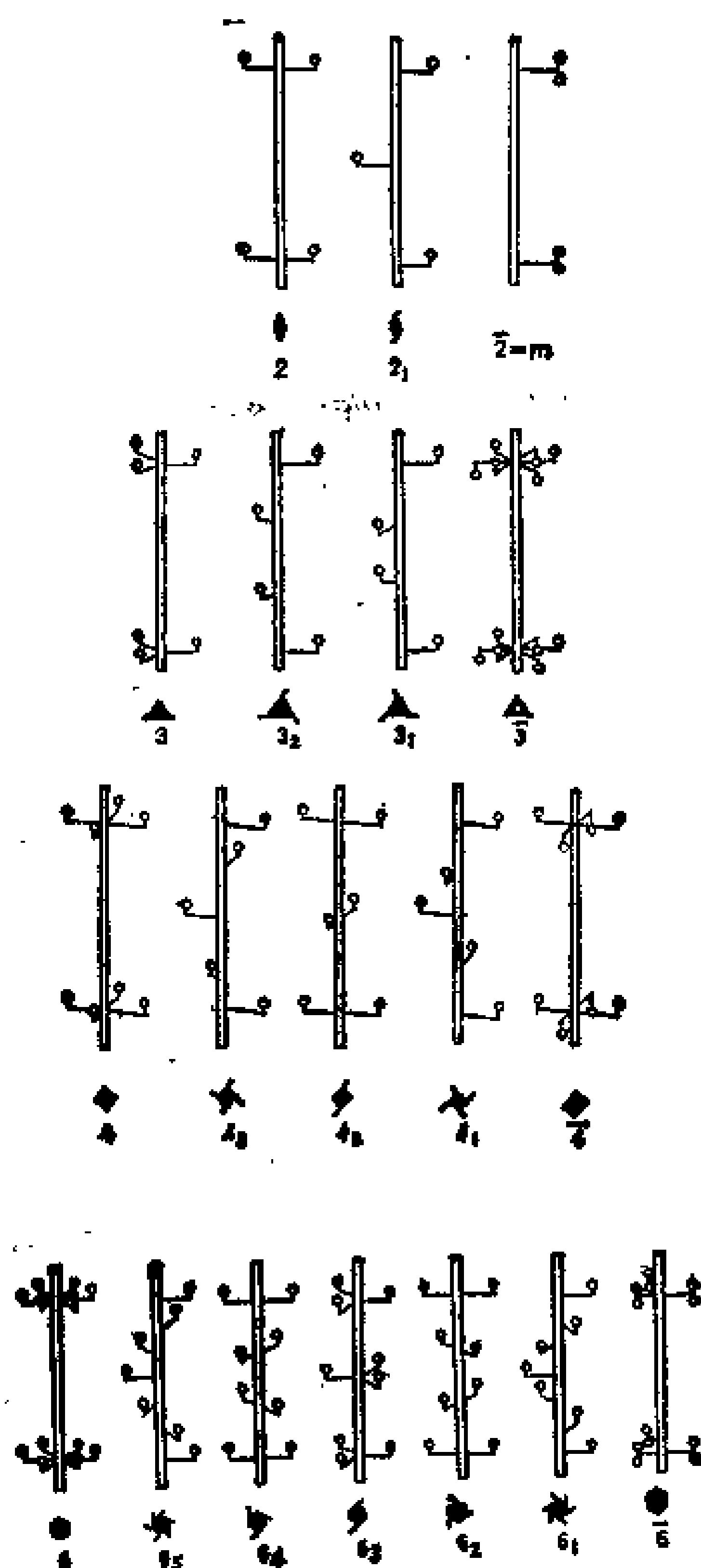


图 2-9 具有各类对称轴的图形（图中对称轴下方的小图形是相应轴名称的图形记号）

图中所示的结果等价于 1 点顺时针转 90° 后上升 (1/4) a 到达点 2 处，继续重复操作得到点 3、4…。因此，又称 4_1 为右旋、4_3

表 2-3　对称轴及它们的符号、图形与平移量

名称	符号	图形	右旋后沿轴的平移	名称	符号	图形	右旋后沿轴的平移
一次转轴	1			四次转轴	4		
一次反轴	$\bar{1}$			四次螺旋轴	4_1		c1/4
二次转轴	2				4_2		c2/4
		(⊥纸面)			4_3		c3/4
		(∥纸面)		四次反轴	$\bar{4}$		
二次螺旋轴	2_1		c1/2	六次转轴	6		
		(⊥纸面)	a1/2 或b1/2	六次螺旋轴	6_1		c1/6
		(∥纸面)			6_2		c2/6
三次转轴	3				6_3		c3/6
三次螺旋轴	3_1		c1/3		6_4		c4/6
	3_2		c2/3		6_5		c5/6
三次反轴	$\bar{3}$			六次反轴	$\bar{6}$		

* 纸面为a、b基矢构成的面

为左旋.图 2-7 和 2-8 中的 *c* 和 *a* 都是基矢长度.

转轴、反轴和螺旋轴统称为对称轴,图 2-9 是具有各种对称轴

的图形。而表 2-3 中给出了各类对称轴的名称、符号、图形和平移量。

（三）反映-平移操作与滑动面

反映-平移操作是先以一平面为镜面进行反映，再将反映后的图形沿平面上某一方向滑动某一距离的操作。操作时所借助的平面称为滑动面。图 2-10 表示的由小旗 1、2、3、4…构成的对称图形具有滑动面。小旗 1 经反映后到 1′ 位置，1′ 再沿 c 方向滑动 (1/2) c 达到 2 位置，如此重复，构成整个对称图形。滑动面的符号随它在面上的滑动方向而异。反映后沿 a、b、c 三个基矢方向滑动时，分别记滑动面为 a、b 和 c；沿阵胞面对角线方向或体对角线方向滑动其长度的 1/2 时，记为 n；滑动 1/4 时，记

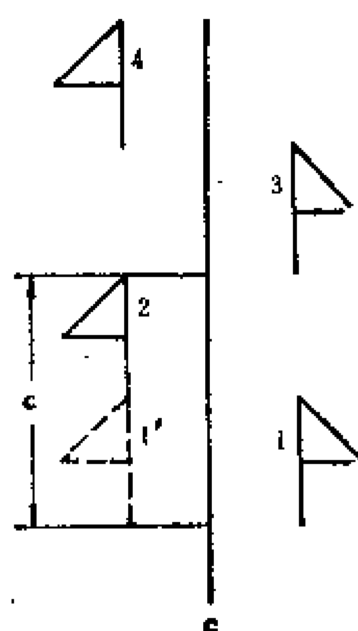


图 2-10　具有滑动面 c 的图形

为 d。表 2-4 给出各种对称面的名称、符号和性质。其中的 a、b、c 皆为点阵参数。

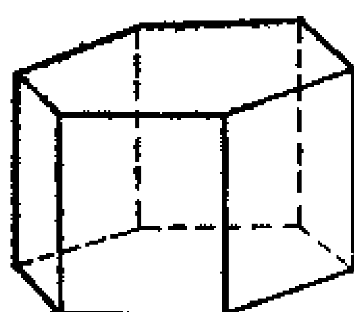
表 2-4 各类对称面的名称与性质

名称	符号	图形		滑动性质
		⊥纸面*	∥纸面	
反映对称面（镜面）	m	——	⌐ ⁄	
轴滑动面	a、b	-----	↓ ↰ ↲	沿 [100] 滑动 $\frac{a}{2}$ 或沿 [010] 滑动 $\frac{b}{2}$ 或沿 <100> 滑动沿 [001] 滑动 $\frac{c}{2}$
	c	……		
对角滑动面	n	—·—·—	↘	滑动 $(a+b)/2$ 或 $(b+c)/2$ 或 $(a+c)/2$；或 $(a+b+c)/2$
金刚石滑动面	d	—·←·— —·→·—	1/8 ↘ ↙ 3/8	滑动 $(a+b)/4$ 或 $(b+c)/4$ 或 $(a+c)/4$；或 $(a+b+c)/4$

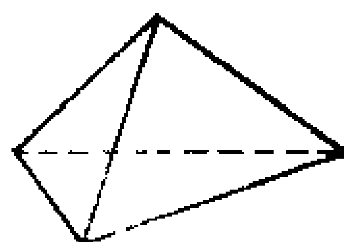
* 纸面为由 a、b 基矢构成的平面

练 习 题

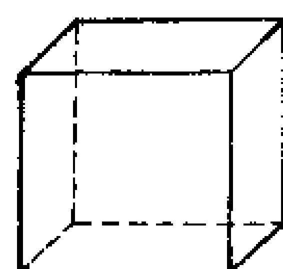
1. 请画出图 2-11 中各形体的 2、3、4 和 6 次轴，并用图形记号表示。



(a)



(b)


(c)

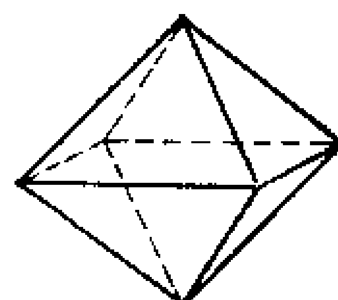

(d)

图 2-11　几种形体

(a) 六棱柱；(b) 正四面体；(c) 立方体；(d) 正八面体

2. 请在图 2-11 中画出各形体的对称面。
3. 请给出图 2-12 中存在的对称元素。图形是由相同的字母"*P*"构成。

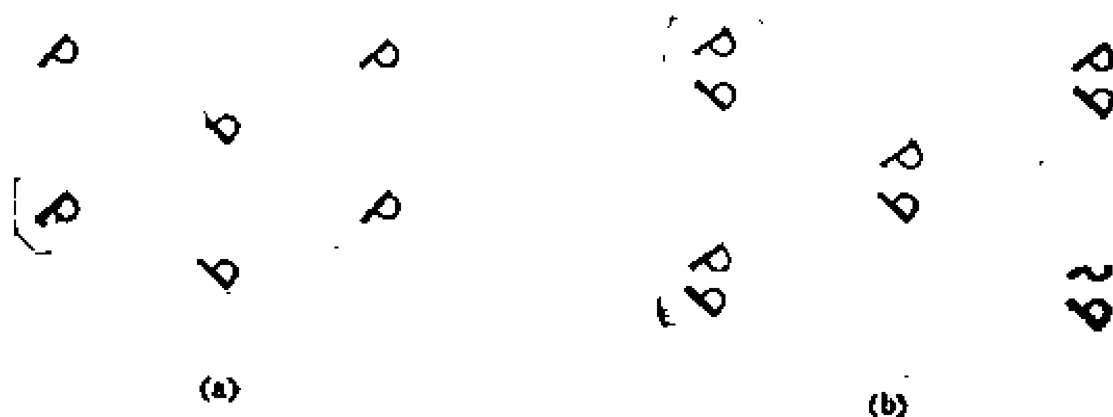

(a)　(b)

图 2-12　对称图形，(a) 和 (b) 都是由相同的字母"*P*"构成

4. 金刚石的结构晶胞如图 1-21(c) 所示。碳原子在立方体的顶角、面心和体对角线距顶角 1/4 处，但一条体对角线仅有一个碳原子。请在金刚石结构晶胞内画出一个金刚石滑动面。
5. 图 2-13 给出 α-Ti_2N 的结构晶胞，其中"∘"为 Ti 原子位置，"·"为 N 原子位置。请给出 α-Ti_2N 结构中的 4_1 与 4_3 螺旋轴。

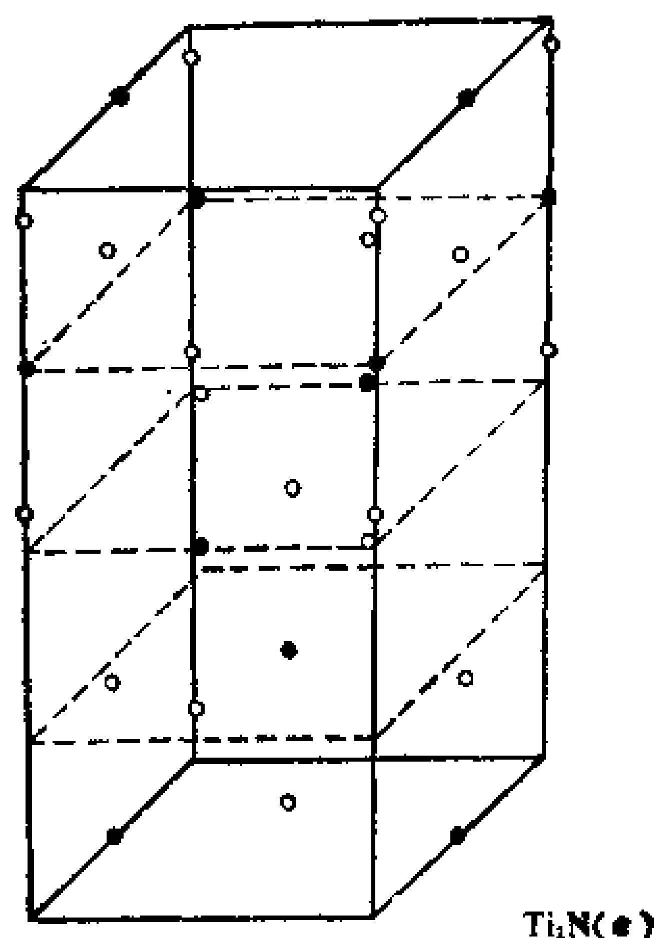


图 2-13 α-Ti_2N 的晶胞

复　习　题

1. 请说明什么是对称图形、对称操作和对称元素?
2. 请说明宏观对称操作与微观对称操作有何区别。
3. 请说明宏观对称操作的类型与意义。
4. 请说明微观对称操作的类型与意义。
5. 请归纳对称元素的名称、符号与图形记号。

第三章　阵胞内几何元素的表示方法

这一章将介绍阵胞内点(原子)的位置，直线(原子排列)的方向和平面(原子面)的取向的表示方法。要说明或解释晶态材料微观状态或微观状态的变化，如空位、间隙、结晶、形态、相变、扩散、晶体取向、结构状况等，总离不开晶体内这些点、线和面的位置、方向和取向。因此，由晶体学工作者商议规定的这些点、线、面的称呼方法是晶体学语言，材料工作者之间要用它相互讨论问题，阐明观点，交流经验。

为了表示阵胞(或晶胞)内的上述各个量，应先选取坐标系。人们规定以阵胞的基矢群为坐标轴，即以阵胞的三个棱为坐标轴，并且以各自的棱长为单位，而不是以统一的Å或 cm 等为单位。

一、阵胞中点的位置

阵胞(晶胞)中结点(原子)、间隙或空位等的位置都涉及点的位置。取阵胞的基矢群为坐标轴，阵胞中点的位置就是此点在该坐标系中的坐标。

图 3-1 给出三斜系中一阵胞的基矢群 $\boldsymbol{a}$、$\boldsymbol{b}$ 和 $\boldsymbol{c}$，为清楚起见并未画出整个阵胞的形状。此处的 $\boldsymbol{a}$、$\boldsymbol{b}$、$\boldsymbol{c}$ 之间既不相互垂直，也不相互等长。确定阵胞中某一点 p 的坐标的方法为：过 p 点作三个平面，让它们分别平行于每对基矢构成的平面，并与基矢 $\boldsymbol{a}$、$\boldsymbol{b}$、$\boldsymbol{c}$ 分别交于 A、B和C点。从图中看出，线段 $\overline{OA}=\boldsymbol{a}$，

$\overline{OB}=\frac{1}{2}b$, $\overline{OC}=\frac{2}{3}c$，即$P$点的坐标是 1、1/2、2/3。 记为 1 1/2 2/3 或 · 1 1/2 2/3 · .阵胞内点的坐标通常用字母 u、v、w 表示，以符号 uvw 或 · uvw · 记录。

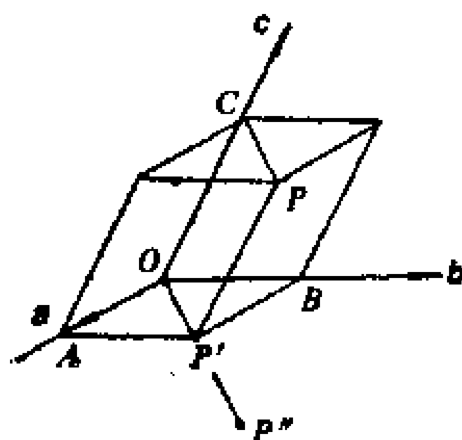


图 3-1 三斜阵胞中点的坐标和方向指数 点坐标为 1 1/2 1/3，CP 方向的指数为 210

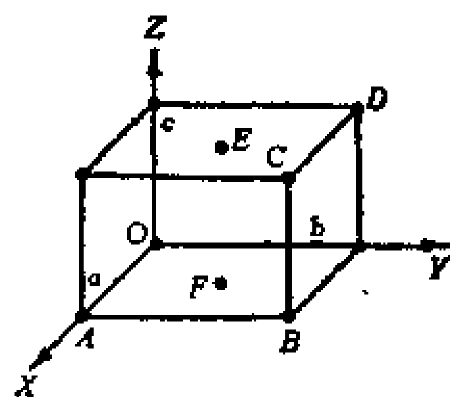


图 3-2 阵胞内点的坐标，A、B、C、D、E 和 F 的坐标分别记为 100、110、111、011、1/2 1/2 1 和 1/2 1/2 0

因此可知，凡处在阵胞顶角上的点，坐标为整数，阵胞内部的点，坐标为分数，而阵胞棱或面上的点，则三指数中有的为整数，有的为分数。图 3-2 中 A、B、C、D、E 和 F 各点的坐标分别记为 100、110、111、011、1/2 1/2 1 和 1/2 1/2 0。于是，简单阵胞 P 中只包含一个结点 000，体心阵胞 I 中包含两个结点 000 和 1/2 1/2 1/2；面心阵胞 F 中包含四个结点 000，1/2 1/2 0、1/2 0 1/2 和 0 1/2 1/2。对于阵胞中的八个顶角，其坐标虽然不同，但相互是等价的，它们的坐标取决于原点的选择，而坐标原点的选择是任意的。

二、阵胞内直线的方向

点阵中的方向就是平移矢的方向，在晶体结构中称为晶向。实际中常用的晶向有原子特定排列方向，原子面切变方向，晶体生长

方向，晶带轴方向等。阵胞中的方向用方向指数表示。以图 3-1 中所示的 CP 方向为例说明方向指数的确定方法：过阵胞原点 O 作 CP 的平行线，该线上与 O 最近坐标为整数的结点为 P'，P' 点的坐标为 210，则此方向以 [210] 标记。任一方向的方向指数记为 [uvw]。因此，阵胞中的方向 [uvw]，就是平移矢 $\boldsymbol{r}=u\boldsymbol{a}+v\boldsymbol{b}+w\boldsymbol{c}$ 的方向。

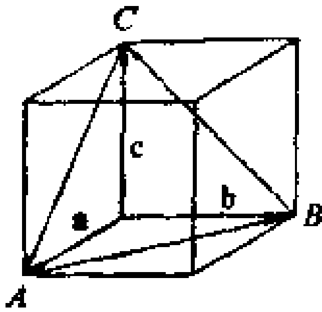


图 3-3 方向指数（其中 AB、BC 和 CA 的方向指数分别为 $[\bar{1}10]$、$[0\bar{1}1]$ 和 $[10\bar{1}]$）

图 3-3 给出了立方阵胞中的三个方向 AB、BC 和 CA，它们的方向指数分别为 $[\bar{1}10]$、$[0\bar{1}1]$ 和 $[10\bar{1}]$。方向指数中数字上的小横表示此数字为负数，也就是结点的此坐标为负值。

三、阵胞中平面的取向

阵胞（或晶胞）中常用的平面是特定的结点（或原子）面，在晶体结构中称为晶面，如滑移面、孪生面、解理面、沉淀面……。面的取向不是用角度而是用代括号的一组数表示，称其为晶面指数。现在以图 3-4 中的 ABC 面为例，说明晶面指数的确定方法。

首先找平面 ABC 在基矢群上的截距，并分别以各自的基矢长度为单位。图 3-4 中 ABC 面的截距为 1/2、1 和 2/3；然后取此截距的倒数，并化为没有公约数的整数，对应 ABC 面有 4、2、3；将所得之数加上圆括号，就得到该面的晶面指数，ABC 面的晶面指数为 (423)。

用上述办法确定的晶面指数称为晶面的米勒指数，一般用 (hkl) 标记。

图 3-5 中所示的三个面 ABC、ABD 和 ABE 的晶面指数

分别为(111)、(112)和(113)。从图中可以看出，这三个面都平行于一个方向 *AB*。此外还有一系列的面，如 *ABP* 等，也平行于 *AB* 方向。称此平行于某一方向的晶面为同带面，它们构成一个晶带，该方向为晶带的带轴，也是晶带的名称。图 3-5 中所示的是 $[\bar{1}10]$ 晶带。

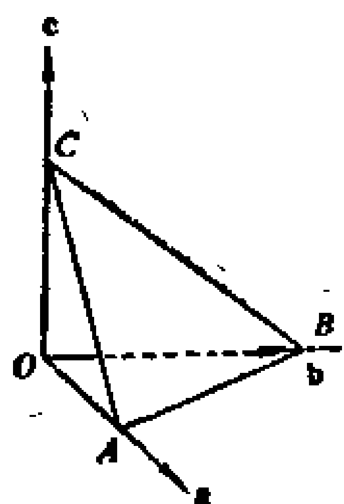


图 3-4 *ABC* 面在基矢群上的截距为 1/2、1 和 2/3，其米勒指数为(423)

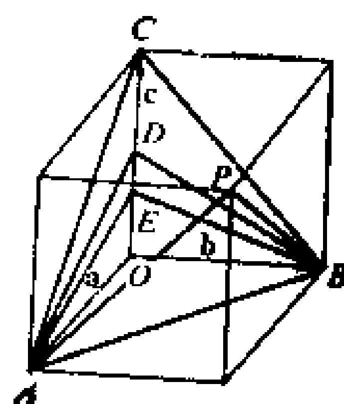


图 3-5 晶带——平行某一方向的晶面，*AB* 为 [110] 方向，*ABC*、*ABD*、*ABE* 和 *ABP* 分为(111)、(112)、(113)和 $(11\bar{1})$ 面，它们同属于 $[\bar{1}10]$ 晶带

在立方系中，晶面与其法线方向同名，例如(111)面的法线为[111]方向。

四、阵胞中的等价点、方向和面

阵胞内有一系列的点、方向和面，它们之间是由特定的对称元素相联系的，称这些点、方向和面分别为等价点、方向和面，这是因为它们彼此之间在几何上和物理上都是等价的，也就是它们彼此之间是不可区分的。

图 3-6 所示的立方阵胞中，各个顶角之间可由四次轴相联系，

因此它们都是等价点。图中 OE、AF、DG 和 BC 方向也由四次轴相联系，它们也是等价的。对于立方系，等价方向的指数由方向指数中三个数字正负数的全部排列构成。例如，方向 $[110]$、$[1\bar{1}0]$、$[\bar{1}10]$、$[\bar{1}\bar{1}0]$、$[101]$、$[\bar{1}01]$、$[10\bar{1}]$、$[\bar{1}0\bar{1}]$、$[011]$、$[0\bar{1}1]$、$[01\bar{1}]$ 和 $[0\bar{1}\bar{1}]$ 为等价方向。

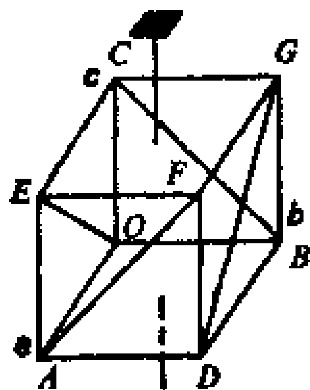


图 3-6 AF、DG、BC 和 OE 方向由四次轴相联系，为等价方向

互为等价的一系列方向，称为晶向族，记为 $\langle uvw\rangle$. 上述 12 个方向属 $\langle 110\rangle$ 晶向族。对于非立方系，晶向族内包括的方向就不再是方向指数中三个数字的全排列。例如，正方晶系的 $\langle 110\rangle$ 晶向族内只包括 $[110]$、$[1\bar{1}0]$、$[\bar{1}10]$ 和 $[\bar{1}\bar{1}0]$ 四个方向。同样，互为等价的一系列面称为晶面族，记为 $\{hkl\}$。对于立方系，$\{111\}$ 包括 (111)、$(11\bar{1})$、$(\bar{1}11)$、$(1\bar{1}1)$、$(\bar{1}\bar{1}1)$、$(1\bar{1}\bar{1})$ 、$(\bar{1}1\bar{1})$ 和 $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$。

表 3-1 中归纳了点、线、面和点线、面族的标记符号。

表 3-1 点、线、面与点、线、面族的标记符号

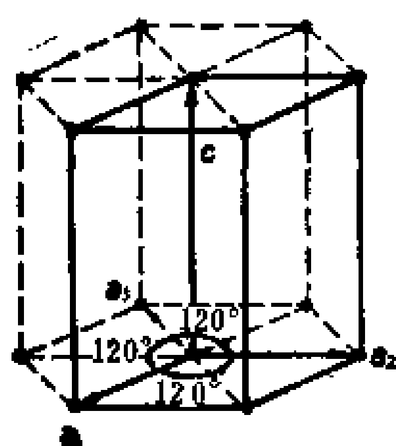
名　称	特定点、线、面的标记符号	点、线、面族的标记符号
点的位置	$\cdot uvw \cdot$ 或 uvw	$:uvw:$
线(方向或晶向)	$[uvw]$	$\langle uvw\rangle$
面(平面或晶面)	(hkl)	$\{hkl\}$

五、六方晶系中的米勒指数和米勒-布拉维指数

确定六方阵胞中的面和方向指数，可以采用不同的轴系，这里只介绍应用最广的六方轴系，以及在此轴系中确定的米勒指数与米勒-布拉维指数。

（一）六方晶系中的晶面指数

六方晶系的阵胞中，沿 c 轴方向存在六次轴，所以图 3-7 中的各个六棱柱面为等价面，属同一晶面族．然而用一般的三指数系统（基矢群为 $\boldsymbol{a}_1$、$\boldsymbol{a}_2$ 和 $\boldsymbol{c}$）标定这些棱柱面时，它们的米勒指数依次为 (100)、(010)、$(\bar{1}10)$、$(0\bar{1}0)$ 和 $(1\bar{1}0)$，即在等价面的指数之间不存在数字上的排列关系．但当采用四指数系统时，即用基矢群 $\boldsymbol{a}_1$、$\boldsymbol{a}_2$、$\boldsymbol{a}_3$ 和 $\boldsymbol{c}$ 时，在图 3-7(a) 中，上述各面的指数就成为 $(10\bar{1}0)$，$(01\bar{1}0)$、$(\bar{1}100)$、$(\bar{1}010)$、$(0\bar{1}10)$ 和 $(1\bar{1}00)$，它们之间呈现出相同数字正负值的排列关系，记为 $\{10\bar{1}0\}$．一般情况下记为 $\{hkil\}$．因为新添加的基矢 $\boldsymbol{a}_3=-(\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2)$，所以 $i=-(h+k)$．称此时的晶面指数为米勒-布拉维指数．有时也将 $\{hkil\}$ 写成 $\{hk.l\}$ 的形式．表 3-2 给出了六个棱柱面的米勒指数与米勒-布拉维指数．图 3-7(b) 中标绘出了 (0001)、$(1\bar{1}00)$、$(10\bar{1}1)$ 和 $(\bar{1}2\bar{1}0)$ 面．



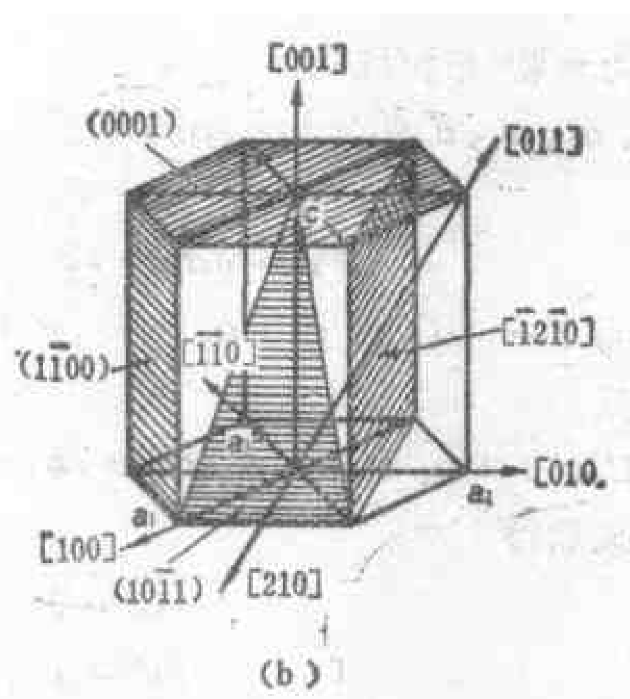


图 3-7　六方阵胞

(a) 阵胞的基矢；(b) 阵胞中的晶面和方向指数

表 3-2 六个棱柱面的米勒指数与米勒-布拉维指数

米勒指数	米勒-布拉维指数	
(hkl)	$(hkil)$	$(hk.l)$
100	$10\bar{1}0$	10.0
010	$01\bar{1}0$	01.0
$\bar{1}10$	$\bar{1}100$	$\bar{1}1.0$
$\bar{1}00$	$\bar{1}010$	$\bar{1}0.0$
$0\bar{1}0$	$0\bar{1}10$	$0\bar{1}.0$
$1\bar{1}0$	$1\bar{1}00$	$1\bar{1}.0$

（二）六方晶系中的方向指数

六方晶系中，以 $\boldsymbol{a}_1$、$\boldsymbol{a}_2$、$\boldsymbol{c}$ 为基矢群定出的方向指数记为 $[u\,v\,w]$，其底面上六个等价方向的指数分别为 [100]、[110]、[010]、[$\bar{1}$00] [$\bar{1}\bar{1}$0] 和 [0$\bar{1}$0]，见图 3-8. 这些指数没有反应出它们之间的等价关系. 同样，以 $\boldsymbol{a}_1$、$\boldsymbol{a}_2$、$\boldsymbol{a}_3$、$\boldsymbol{c}$ 为基矢群时，能获得六方系中方向的四指数，记为 $[uvtw]$ 要求 $t=-(u+v)$，称为米勒-布拉维指数. 对于某一平移矢 $\boldsymbol{r}$，其在 $\boldsymbol{a}_1$、$\boldsymbol{a}_2$、$\boldsymbol{c}$ 和 $\boldsymbol{a}_1$、$\boldsymbol{a}_2$、$\boldsymbol{a}_3$、$\boldsymbol{c}$ 两坐标系中的表达式分别为

$$\boldsymbol{r}=U\boldsymbol{a}_1+V\boldsymbol{a}_2+W\boldsymbol{c}$$

$$\boldsymbol{r}=u\boldsymbol{a}_1+v\boldsymbol{a}_2+t\boldsymbol{a}_3+w\boldsymbol{c}$$

因为 $t=-(u+v)$，$\boldsymbol{a}_3=-(\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2)$

所以

$$U\boldsymbol{a}_1+V\boldsymbol{a}_2+W\boldsymbol{c}=u\boldsymbol{a}_1+v\boldsymbol{a}_2+(u+v)(\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2)+w\boldsymbol{c}$$

整理后得

$$\begin{cases}U=2u+v\\V=u+2v\\W=w\end{cases}\tag{3-1}$$

及

$$\begin{cases} u = \frac{1}{3}(2U - V) \\ v = \frac{1}{3}(2V - U) \\ w = W \end{cases} \tag{3-2}$$

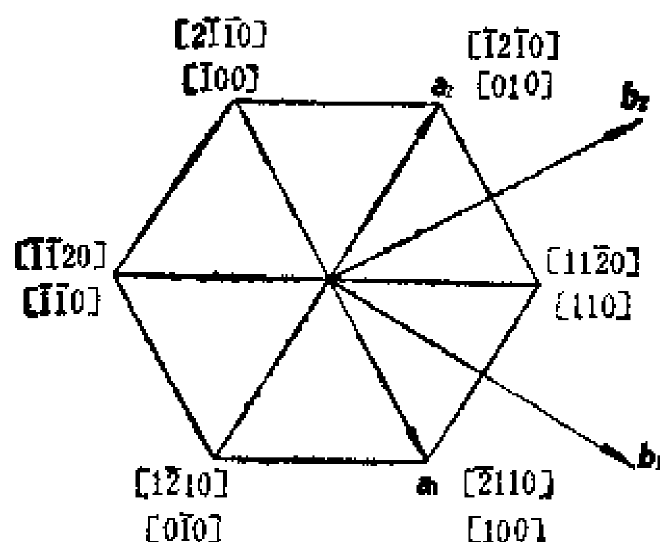


图 3-8 六方阵胞基面上的方向

所以通常可用 $\boldsymbol{a}_1$、$\boldsymbol{a}_2$、$\boldsymbol{c}$ 三坐标系定出方向的米勒指数 [UVW]，再用 (3-2) 式变成方向的米勒-布拉维指数 [$uvtw$]. 这时图 3-8 中六个方向的指数为：[2$\bar{1}\bar{1}$0]、[11$\bar{2}$0]、[$\bar{1}$2$\bar{1}$0]、[$\bar{2}$110]、[$\bar{1}\bar{1}$20] 和 [1$\bar{2}$10]。这些指数体现出了六方阵胞的六次对称性.

在一般情况下，也可以用图 3-8 中所示的新坐标系 $\boldsymbol{b}_1$、$\boldsymbol{b}_2$、和 $\boldsymbol{c}$，按三指数时的确定方法定出四指数中的 u、v、w，再按 $t = -(u + v)$ 计算出 t，就方便地获得了某方向的米勒-布拉维指数. 所以新坐标系 $\boldsymbol{b}_1$、$\boldsymbol{b}_2$、$\boldsymbol{c}$ 与原坐标系 $\boldsymbol{a}_1$、$\boldsymbol{a}_2$、$\boldsymbol{c}$ 加 (3-2) 式等效. 表 3-3 列出基面上六角方向的米勒指数与米勒-布拉维指数. 图 3-9 列出了 $\boldsymbol{a}_1$、$\boldsymbol{a}_2$、$\boldsymbol{c}$ 与 $\boldsymbol{b}_1$、$\boldsymbol{b}_2$、$\boldsymbol{c}$ 坐标系与方向.

表 3-4 列出了图 3-9 中给出的方向在三指数系统与四指数系统中的指数.

六方系中，一般情况下同名的晶面和晶向并不互相垂直，但对

表 3-3　六方系基面中六角方向的米勒指数与米勒-布拉维指数

米勒指数	米勒-布拉维指数		
[UVW]	uvw[注]	[$uvtw$]	[$uv.w$]
100	$2\bar{1}0$	$2\bar{1}\bar{1}0$	$2\bar{1}.0$
110	110	$11\bar{2}0$	11.0
010	$\bar{1}20$	$\bar{1}2\bar{1}0$	$\bar{1}2.0$
$\bar{1}00$	$\bar{2}10$	$\bar{2}110$	$\bar{2}1.0$
$\bar{1}\bar{1}0$	$\bar{1}\bar{1}0$	$\bar{1}\bar{1}20$	$\bar{1}\bar{1}.0$
$0\bar{1}0$	$1\bar{2}0$	$1\bar{2}10$	$1\bar{2}.0$

注：四指中三个指数 uvw 的获得方法有两种：

1. 由米勒指数用公式(3-2)计算出；
2. 由新坐标系 b_1、b_2 和 c 定出。

于四指数的 (000l) 和 {hki0} 例外，即 (000l)⊥[000l]，(hki0)⊥[hki0]。

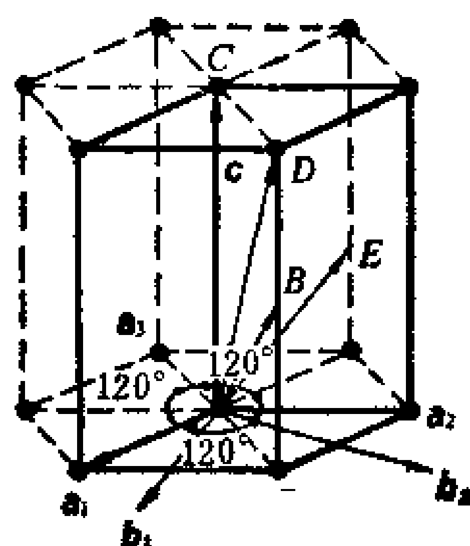


图 3-9　a_1、a_2、c 与 b_1、b_2、c 坐标系与方向

表 3-4　图 3-9 中晶向的米勒指数与米勒-布拉维指数

方向	米勒指数 [UVW]	米勒-布拉维数中的 uvw	米勒-布拉维指数 [$uvtw$]
OD	[111]	113 或 [11.3]	[$11\bar{2}3$]
OB	[221]	223 或 [22.3]	[$22\bar{4}3$]
OE	[121]	011 或 [01.1]	[$01\bar{1}1$]

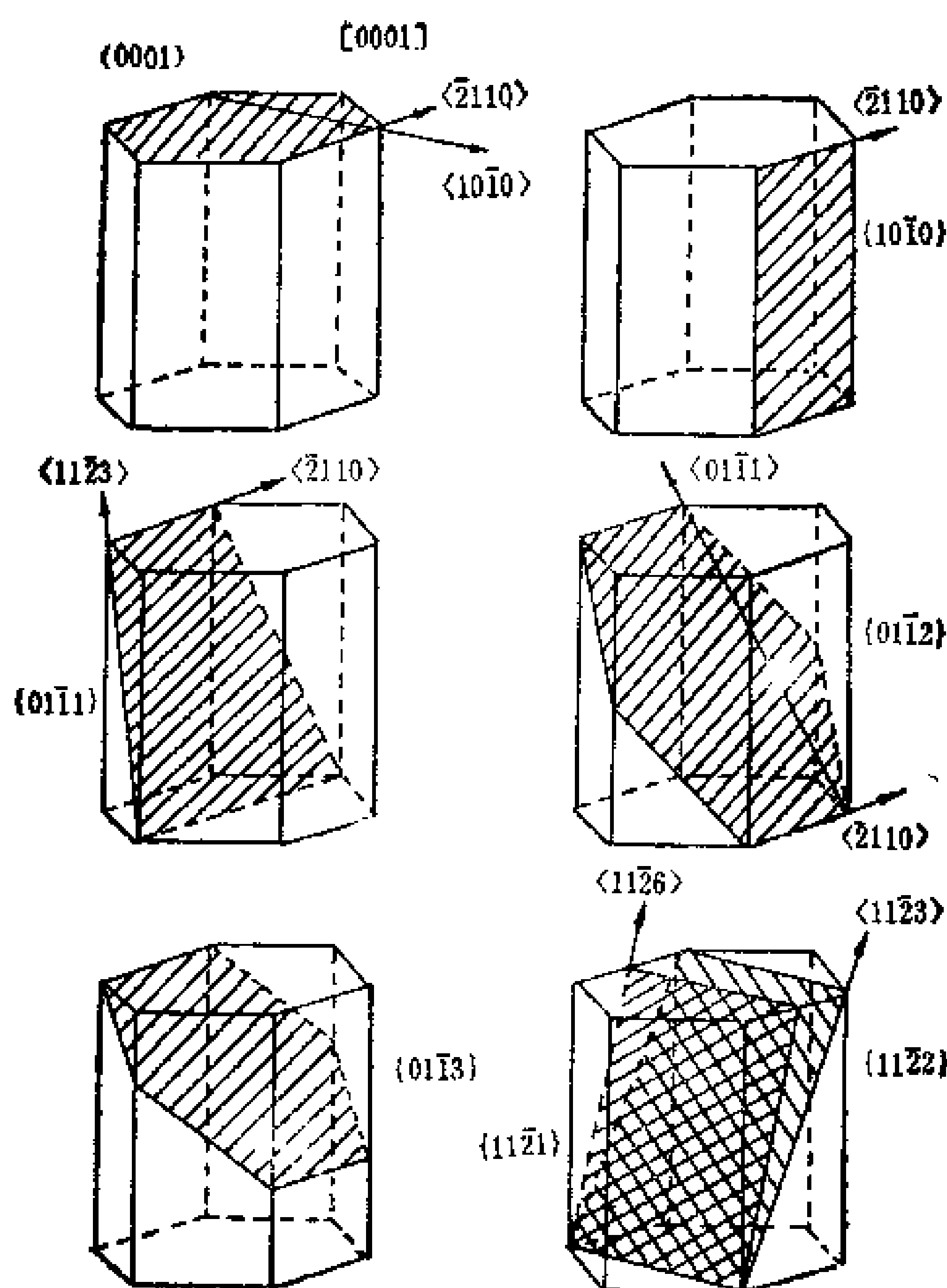


图 3-10 六方晶系中的主要面和方向

表 3-5 列出了常用的低指数晶面和晶向的米勒指数和米勒-布拉维指数。图 3-10 给出了六方系中重要的面和方向。在表 3-5 的三列数字中，每一行都是同一方向的三种表示方法；同时，第二、三列的二组数，也是同一晶面的两种表示方法。

表 3-5　六方系中一些方向和面的米勒指数和米勒-布拉维指数

米勒指数	米勒-布拉维指数	
[*UVW*]	[*uvtw*] 指数	[*uv*、*w*] 指数
*{001	0001	001
330	1120	110
*030	$\bar{1}2\bar{1}0$	$\bar{1}20$
300	$2\bar{1}\bar{1}0$	$2\bar{1}0$
031	$\bar{1}2\bar{1}1$	$\bar{1}21$
012	$\bar{1}2\bar{1}6$	$\bar{1}26$
333	1123	113
*033	$\bar{1}2\bar{1}3$	$\bar{1}23$
303	2113	$\bar{2}13$
021	$24\bar{2}3$	$\bar{2}43$
210	$10\bar{1}0$	100
*120	$01\bar{1}0$	010
$\bar{1}10$	$\bar{1}100$	$\bar{1}10$
211	$10\bar{1}1$	$10\bar{1}$
121	$01\bar{1}\bar{1}$	$01\bar{1}$
111	$\bar{1}101$	$\bar{1}11$
423	2023	203
243	$02\bar{2}3$	023
$\bar{2}23$	$\bar{2}203$	$\bar{2}23$
212	$10\bar{1}2$	102
122	$01\bar{1}2$	012
112	$1\bar{1}02$	$1\bar{1}2$
450	1230	120
310	$5\bar{1}\bar{4}0$	$5\bar{1}0$
$2\bar{1}0$	$5\bar{4}\bar{1}0$	$5\bar{4}0$
311	$5\bar{1}43$	$5\bar{1}3$
$2\bar{1}1$	$54\bar{1}3$	$5\bar{4}3$
411	7233	$7\bar{2}3$
柏格斯矢量的指数	米勒-布拉维指数（*hkil*）	米勒指数（*hkl*）
	面	

六、面 间 距

(hkl) 面，实际上包括一系列相互平行的等间距的面，如图 3-11 所示，称之为面列．面间距是指面列中相邻两平面之间的垂直距离．图 3-11 为(111)面列中的一部分，OP 是(111)面的垂直线，它被(111)面分割成相等的长度，即 $OP_1 = P_1P_2 = P_2P_3 = \cdots = d$，$d$ 就是(111)面的面间距，记为 d_{111}．

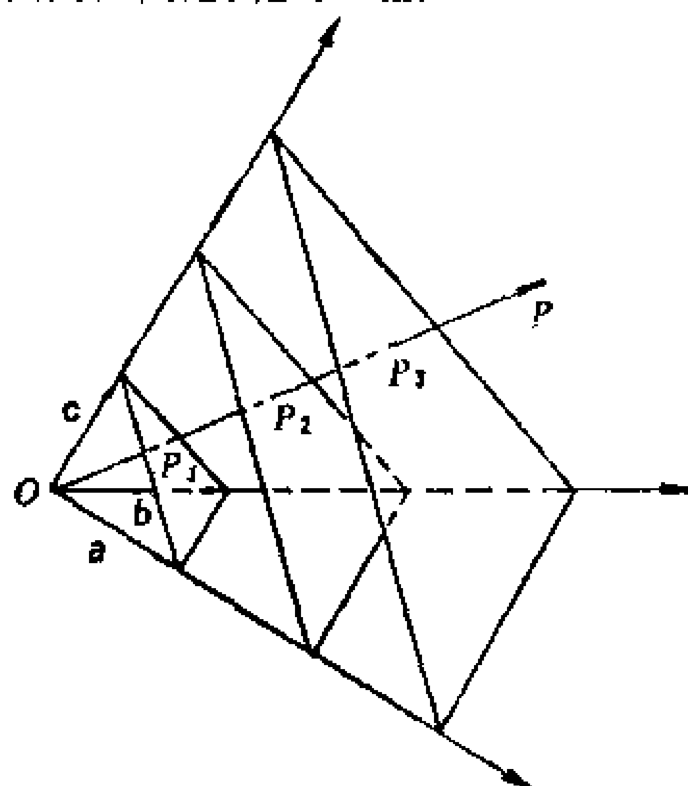


图 3-11　面列与面间距

面间距的大小是晶面指数 (hkl) 与点阵参数 $\boldsymbol{a}$、$\boldsymbol{b}$、$\boldsymbol{c}$ 和 α、β、γ 的函数．对立方系有

$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \qquad (3\text{-}3)$$

对六方系有

$$\frac{1}{d^2} = \frac{4}{3}\left(\frac{h^2 + hk + k^2}{a^2}\right) + \frac{l^2}{c^2} \qquad (3\text{-}4)$$

也就是，晶面指数越低，面间距越大，晶面指数越高，面间距越小．

一般地说，面间距大的晶面，面上的结点密度就大，面间距小的晶面，其上结点密度就小，如图 3-12 所示．结点密度大的面，在结晶、形变、相变等过程中，特别是衍射过程中，起主要作用，所以应给以较大的注意．

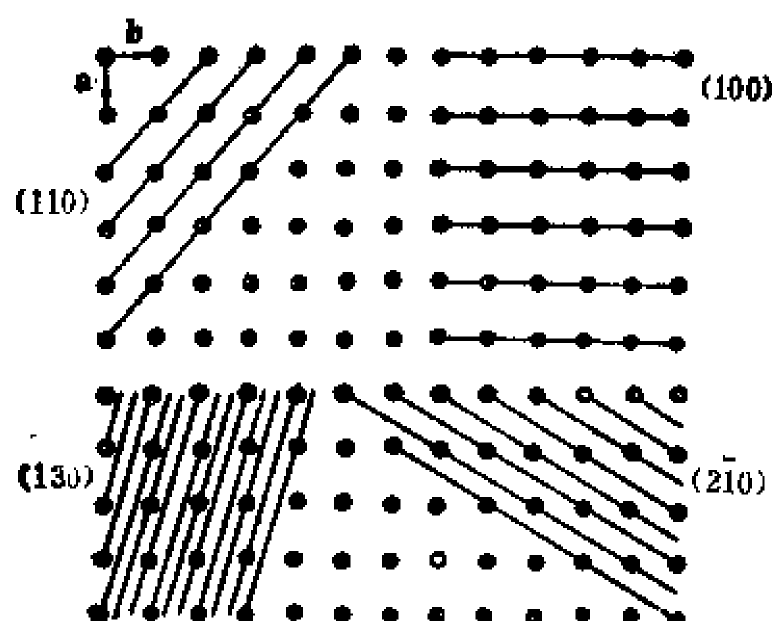


图 3-12　晶面指数与面间距

练　习　题

1. 请写出面心立方阵胞中六个面心结点的位置．
2. 请在正方晶胞中画出 $(11\bar{1})$ 面和 [112] 方向．
3. 请给出图 3-13 各面的米勒指数．
4. 图 3-14 给出了面心立方复胞中的原胞 (a) 和体心立方复胞中的原胞 (b)．请以复胞的基矢群为坐标系给出各原胞基矢的方向指数．
5. 请给出图 3-15 中 P 与 Y 面的指数．
6. 图 3-16 中给出了汤姆逊四面体 (a) 和它的平面展开图 (b)，两图中所标的字母相互对应．请给出四面体各面和棱的指数，以

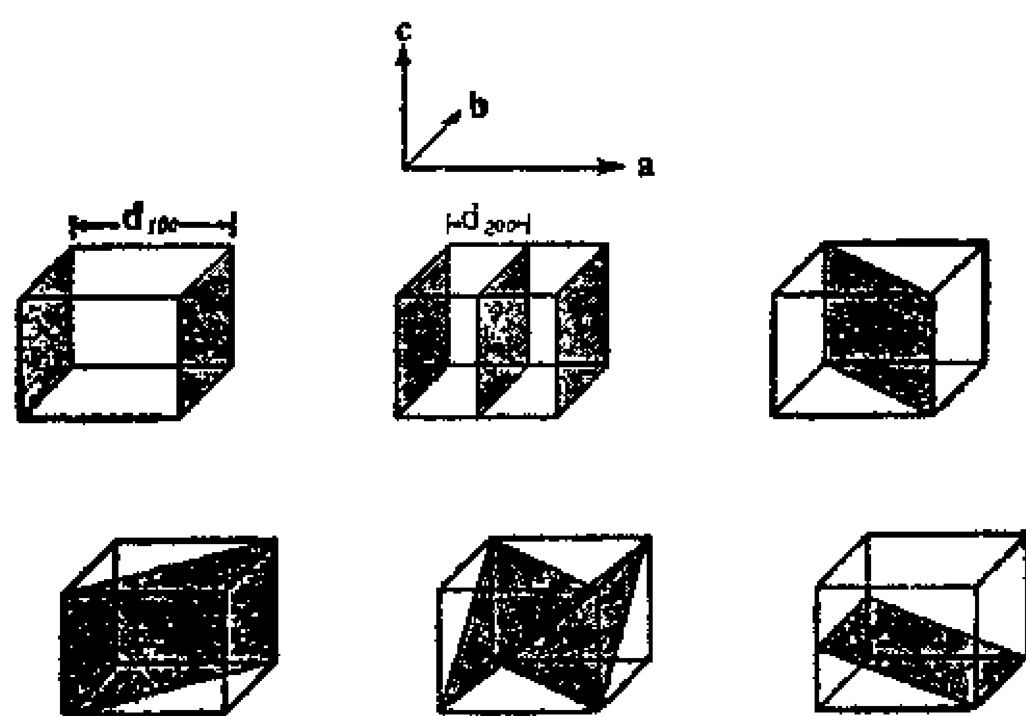


图 3-13　正交系中的几种晶面

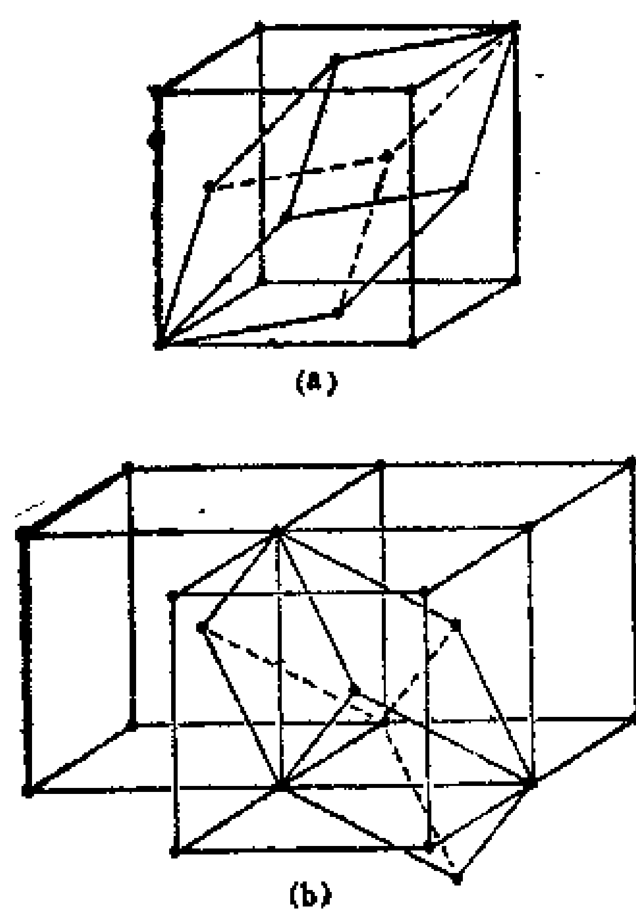


图 3-14　原胞与复胞

(a) 面心立方的原胞与复胞；(b) 体心立方的原胞与复胞

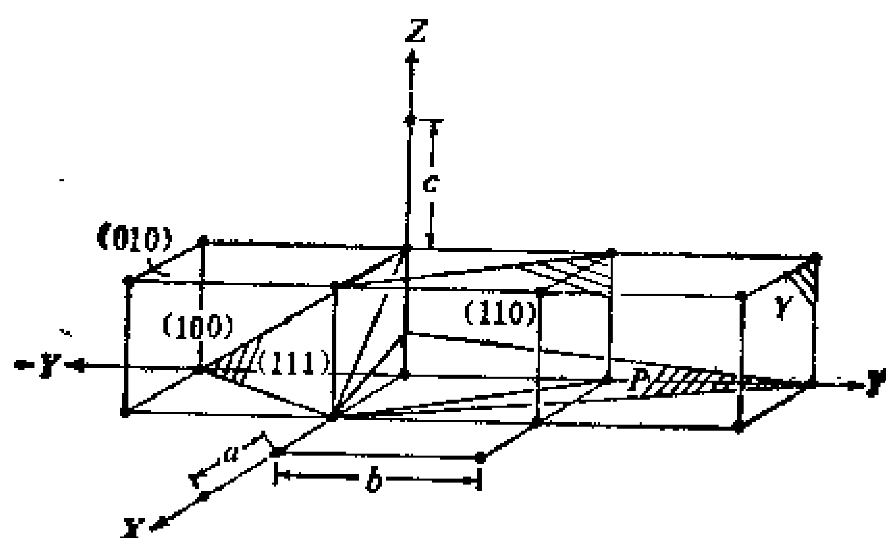


图 3-15 晶面指数

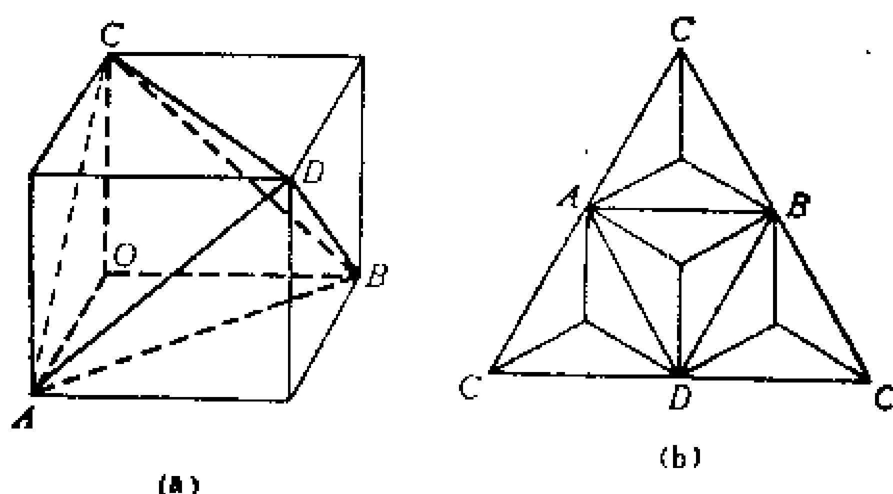


图 3-16 汤姆逊四面体及其展开图，两图中的字母是相互对应的.

(a) 汤姆逊四面体；(b) 汤姆逊四面体的展开图

及 (b) 中各指向三角形重心方向的指数.

7. 请给出图 3-17 中六棱柱 (a) 和基面 (b) 中的方向指数. 并在 (*a*) 图中给出 [$10\bar{1}1$] 方向.

8. 请在立方晶胞中给出 {120} 面，并标上特定的面指数，并在正方晶胞内重复上述工作.

9. 请计算立方系的面间距 d_{100}，d_{111} d_{220}.

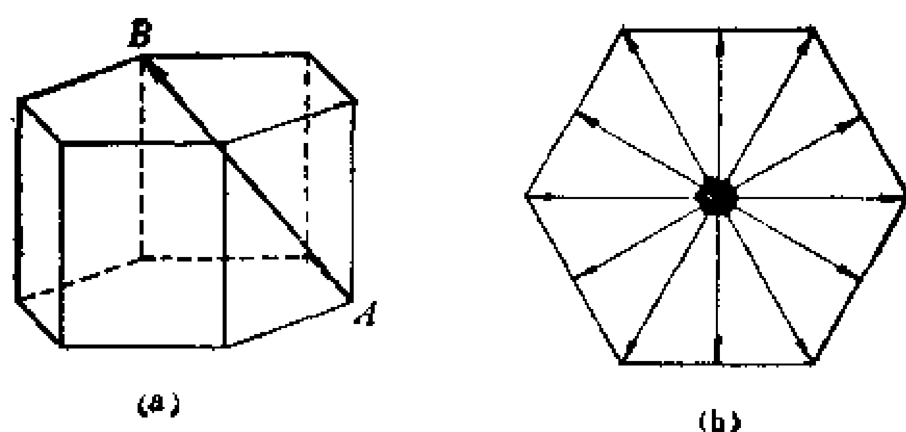


图 3-17　六棱柱

(a) 六棱柱体；(b) 六棱柱的基面

复　习　题

1. 请说明如何决定阵胞内结点的坐标?
2. 请说明如何决定阵胞中某方向的指数?
3. 请说明什么是米勒指数,什么是米勒-布拉维指数?
4. 请说明什么是晶带?
5. 请说明符号 $[uvw]$ 与 $\langle uvw\rangle$、(hkl) 与 $\{hkl\}$ 有何不同?
6. 请说明面间距与哪些因素有关?

第四章 点阵类型

点阵是晶体结构平移对称性的几何描述，结点是平移对称元素，点阵中的全部结点构成对称元素群，称之为平移群。晶体中的轴对称与平移对称这两个基本特征是相互制约的，它们统一在晶体结构之中。这种相互制约与相互统一的关系，不仅限制了晶体转轴的轴次，也限制了平移群的类型，即点阵类型。

一、5种平面点阵

对称轴与平面点阵组合时，必须是对称轴垂直于点阵面，否则对称操作后不能使图形复原。所谓对称元素的组合，是指两个以

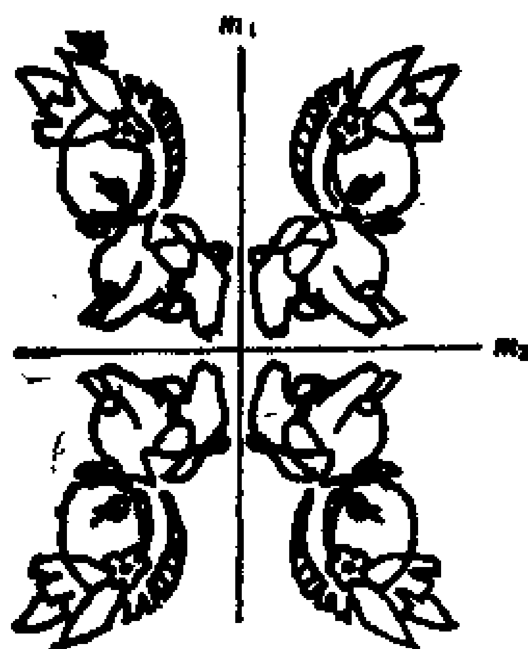


图 4-1 对称面的结合

上的对称元素共同对单位图形起作用。或者说，两个以上的对称元素共同作用于对称图形时，整个图形不变。图 4-1 给出对称面组合的实例，图中的单位图形是一个小驴，两个相互垂直的对称面 m_1 与 m_2 同时作用于单位图形、形成由 4 个小驴构成的对称图形。也就是说，由 4 个小驴构成的图形能同时借助由图示的两个相互垂直的对称面进行对称操作。

下面分别讨论 2、3、4 和 6 次轴与平面点阵的结合。

(一) 二次轴与平面点阵的结合

在图 4-2(a) 所示的平面点阵中，初级矢 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 的大小与方向都是任意的。由初级矢形成的阵胞为平行四边形，称为斜形阵胞，属斜形点阵。在此点阵中，以任一结点为轴，将点阵在其平面内转 180°，都会使转动前后的全部结点相互重合。即操作使点阵复原。因此，在斜形点阵中，过每个结点都有一个与点阵面相互垂直的二次轴。同时借助过任意两结点连线的中点的二次轴进行操作，也能使点阵复原。图 4-2(b) 给出了斜形点阵中二次轴的分布。

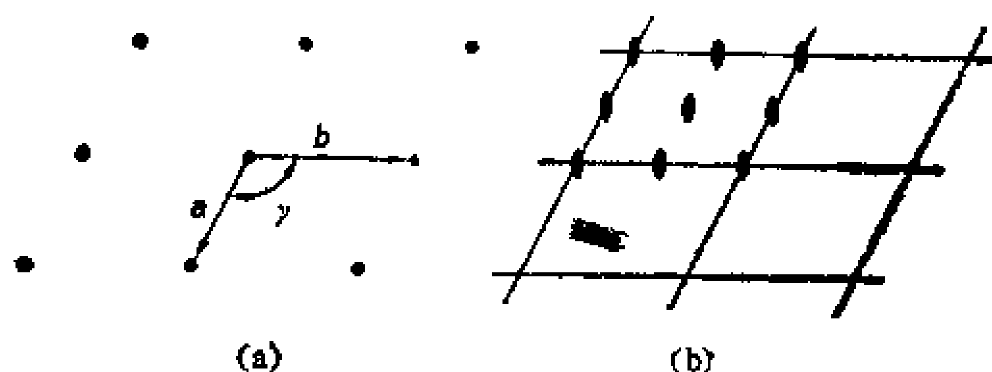


图 4-2　斜形点阵与其中的二次轴

(a) 斜形点阵；(b) 斜形点阵中二次轴的分布

从图 4-2 也可以看出，斜形点阵中不可能存在 3、4、6 次轴和对称面。

假如图 4-2(a) 中的 $\gamma=90°$，即初级矢相互垂直，则点阵的阵胞为矩形，属矩形点阵，如图 4-3(a) 所示。矩形点阵除了具有与斜形点阵相同的二次轴以外，还有两组相互垂直并且垂直于点阵面的对称面，它们平行于结点列。图 4-3(b) 给出了矩形点阵中对称元素的分布。二次轴为对称面的交线。

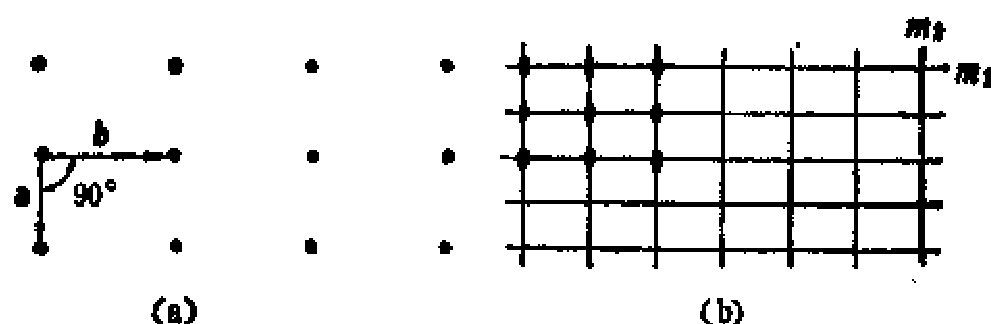


图 4-3 矩形点阵与其中的对称元素

(a) 矩形点阵；(b) 矩形点阵中对称元素的分布

如果图 4-2(a) 所示的斜形点阵中 a、b 等长，方向任意，则形成图 4-4(a) 虚线所示的菱形点阵，与此点阵相容的对称元素分布于图 4-4(b)。从图中看出，菱形点阵具有的对称元素类型与矩形点阵的相同，即都具有二次轴与两组相互垂直的对称面。为了表示菱形点阵存在两组相互垂直的对称面这一特征，一般不取图 4-4(a) 中虚线所示的菱形原胞，而是取图中实线所示的复胞，即有心矩形阵胞。

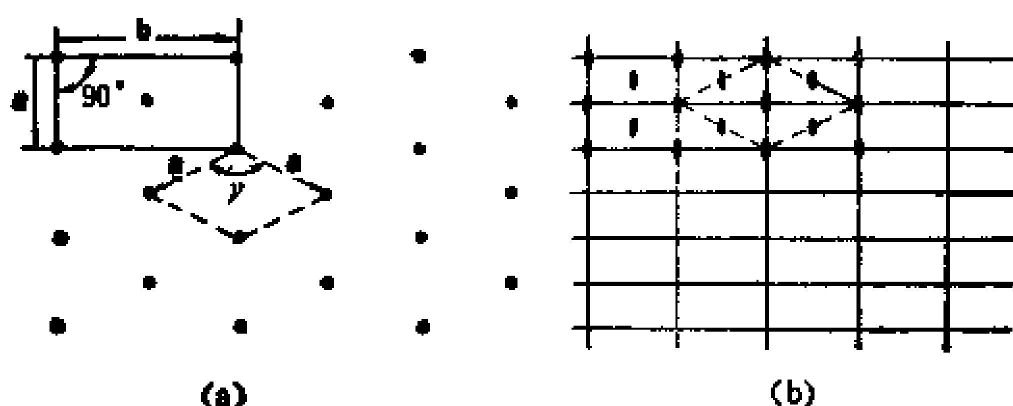


图 4-4 菱形点阵与其中对称元素的分布

(a) 菱形点阵，也为有心矩形点阵；(b) 菱形点阵中对称元素的分布

（二）四次轴与平面点阵的组合

如果有一个四次轴垂直于某一平面点阵，如图 4-5 所示，并且通过结点 A_1。B_1 是点阵中的另一结点，那么由四次轴相连系的点 B_2、B_3 和 B_4 也必然是点阵中的结点。同时，过结点 B_1 也存在四次轴，旋转操作又派生出结点 A_2、A_3 和 A_4。这样，四次轴与平面点阵组合必然形成图 4-6(a) 所示的正方形点阵，具有正方形阵胞。正方形点阵具有的对称元素如图 4-6(b) 所示，即在正方形

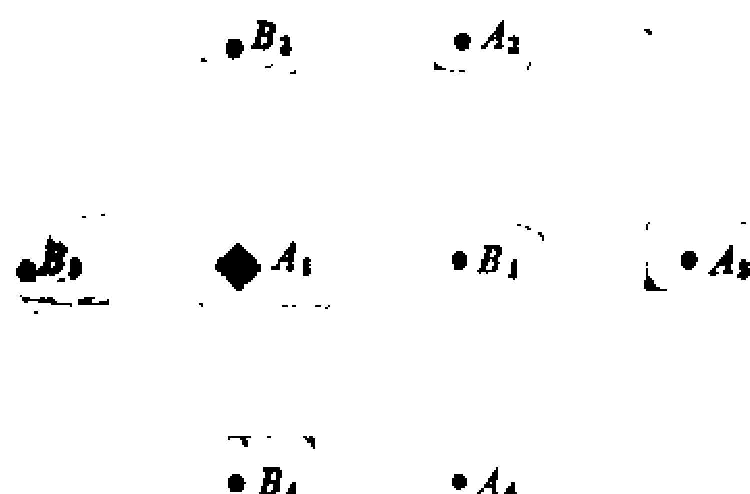


图 4-5 四次轴与平面点阵的组合

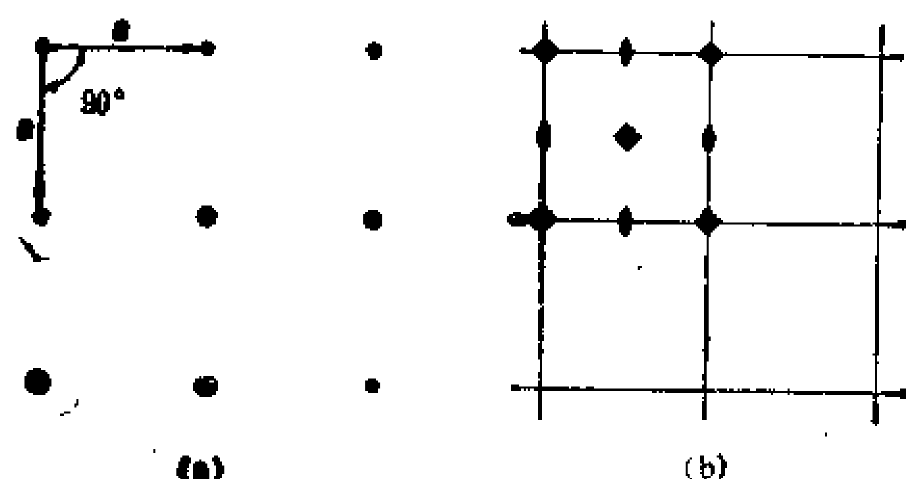


图 4-6 正方点阵与其中对称元素的分布
(a) 正方形点阵；(b) 正方形点阵中对称元素的分布

的四角与中心有与点阵面垂直的四次轴，过阵胞边棱中心有与点阵面垂直的二次轴，过阵胞边棱，边棱的中垂线和正方形对角线都有与点阵面相垂直的对称面。

（三）三次轴、六次轴与平面点阵的组合

三次轴和六次轴与平面点阵组合的结果，都要求点阵中的结点分布在如图 4-7(a) 所示的等边三角形的顶点，即阵胞的两个基矢相等、夹角为 120°，这种点阵称为三角形点阵。对于三角形点阵，过每个结点都有与点阵面相垂直的六次轴，过三角形重心有与点阵面相垂直的三次轴，过三角形各边的中心有与点阵面相垂直的二次轴，此外还有 6 组相互成 30° 且垂直于点阵面的对称面，见图 4-7(b)。

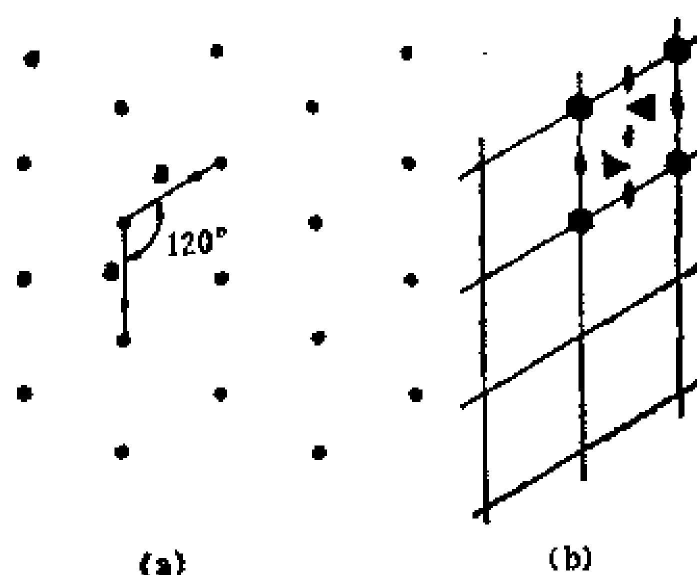


图 4-7 三角形点阵与其中对称元素的分布

(a) 三角形点阵；(b) 三角形点阵中对称元素的分布

在三角形点阵中，为了表示它具有六次轴的对称性，往往取由三个取向不同的菱形组成的复胞为点阵的阵胞，如图 4-7(a) 所示。

综上所述可以得出，平面点阵只有斜形、矩形、有心矩形、正方形和三角形五种形式。表 4-1 归纳了它们的阵胞与对称元素。

表 4·1 5种平面点阵

名　称	阵胞注	对称元素
斜　形	$a \neq b$，γ 任意	二次轴
矩　形	$a \neq b$　$\gamma = 90°$	两组对称面，二次轴
有心矩形	$a \neq b$　$a_0 = b_0$　γ 任意	两组对称面，二次轴
正 方 形	$a = b$　$\gamma = 90°$	四次轴，二次轴，四组对称面
三 角 形（六方形）	$a = b$　$\gamma = 120°$	六次轴，三次轴，二次轴，六组对称面

注：图中"●"为结点

二、4种平面晶系

二维晶体都属于上述5种平面点阵。晶体的结构单元与点阵结合后，晶体的对称性不同于其点阵的对称性。按各种晶胞的最低对称性的要求，将晶体分成4个平面晶系。表4-2中给出了四

个平面晶系的名称和它们所对应的最低对称性要求。

5 种平面点阵分别属于表 4-2 中的 4 个平面晶系。

表 4-2　4 个平面晶系

名　　称	最低对称要求
斜　　形	无
矩　　形	一个对称面
正 方 形	一个四次轴
六 方 形	一个六次轴

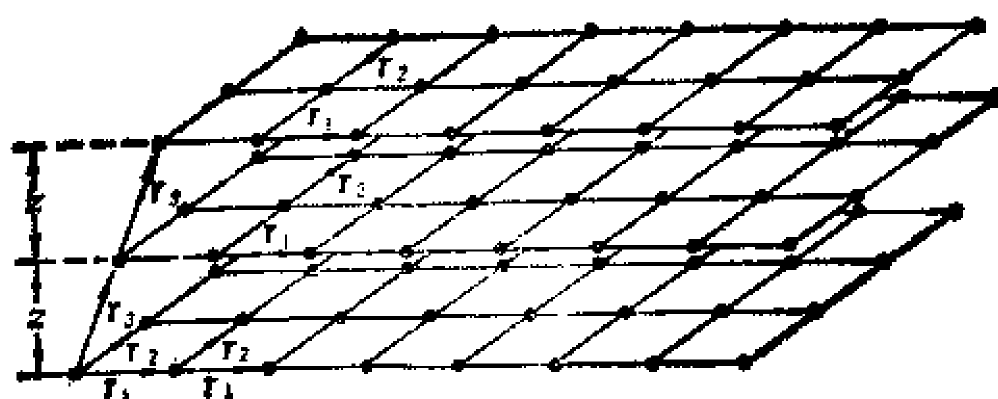
三、14 种空间点阵

可以认为空间点阵是由一系列平面点阵按一定方式扎结而成。点阵的平移特性要求平面点阵相互扎结时必须遵循如下规律：相互扎结的一系列平面点阵必须是相同的；各点阵面之间要相互平行并且间距要相等；要保证轴次相同的对称轴重合(三斜点阵除外)。在下面的讨论中以 $\boldsymbol{T}_1$、$\boldsymbol{T}_2$ 表示平面点阵的基矢，$\boldsymbol{T}_3$ 为两个相邻的点阵面上相互对应的结点之间的矢量。由平面点阵扎结后形成的空间点阵的基矢仍记为 $\boldsymbol{a}$、$\boldsymbol{b}$ 和 $\boldsymbol{c}$。

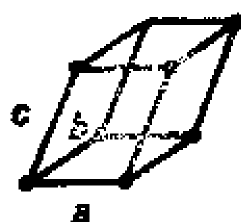
(一) 斜形平面点阵的扎结

图 4-8(a) 所示的情况是斜形平面点阵之间相互扎结的方式之一，此时矢量 $\boldsymbol{T}_3$ 不垂直于点阵面，它们所构成的空间点阵具有三斜阵胞，如图 4-8(b) 所示，因为这时 $\boldsymbol{T}_1$、$\boldsymbol{T}_2$、$\boldsymbol{T}_3$ 分别与 $\boldsymbol{a}$、$\boldsymbol{b}$、$\boldsymbol{c}$ 相同，即 $a \neq b \neq c$，$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90°$。这时的空间点阵为三斜点阵。这种空间点阵只存在对称心，不再有二次轴。

斜形平面点阵之间还有图 4-9 所示的 4 种扎结方式，这时都保证它们所构成的空间点阵具有二次轴。如果扎结时保证各层平



(a)



(b)

图 4-8　斜形平面点阵的扎结与它们形成的阵胞
(a) 扎结方式；(b) 空间点阵的阵胞

面点阵中平行四边形四角处的二次轴相互重合，即 $\boldsymbol{T}_3$ 垂直于 $\boldsymbol{T}_1$、$\boldsymbol{T}_2$ 所在的面，则形成的阵胞如图 4-9(a) 中的粗实线所示，$a \neq b \neq c$，$\boldsymbol{c}\perp(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})$，$\alpha=\beta=90°$，$\gamma\neq 90°$，称为单斜阵胞，构成单斜点阵。有时取 $\boldsymbol{b}\perp(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{c})$。图 4-9(b) 和 (c) 所示的都是保证平行四边形角处与边处的二次轴相互重合的扎结情况，(b) 为角处的二次轴与 $\boldsymbol{T}_1$ 边上的二次轴重合，(c) 为角处的二次轴与 $\boldsymbol{T}_2$ 边上的二次轴重合。这时所构成的空间点阵阵胞都具有侧心。$\boldsymbol{c}$ 轴不同于 $\boldsymbol{T}_3$，但 $\boldsymbol{a}$，$\boldsymbol{b}$ 分别与 $\boldsymbol{T}_1$、$\boldsymbol{T}_2$ 相同。图 4-9(d) 为保证平行四边形角处与中心处二次轴相互重合的扎结。这时空间点阵的阵胞如图中的粗实线所示，$\boldsymbol{a}$、$\boldsymbol{b}$、$\boldsymbol{c}$ 全不同于 $\boldsymbol{T}_1$，$\boldsymbol{T}_2$ 和

T_3，但它也具有侧心。图 4-9(b)、(c) 和 (d) 中所示的三种侧心阵胞，统称为单斜系的底心阵胞。

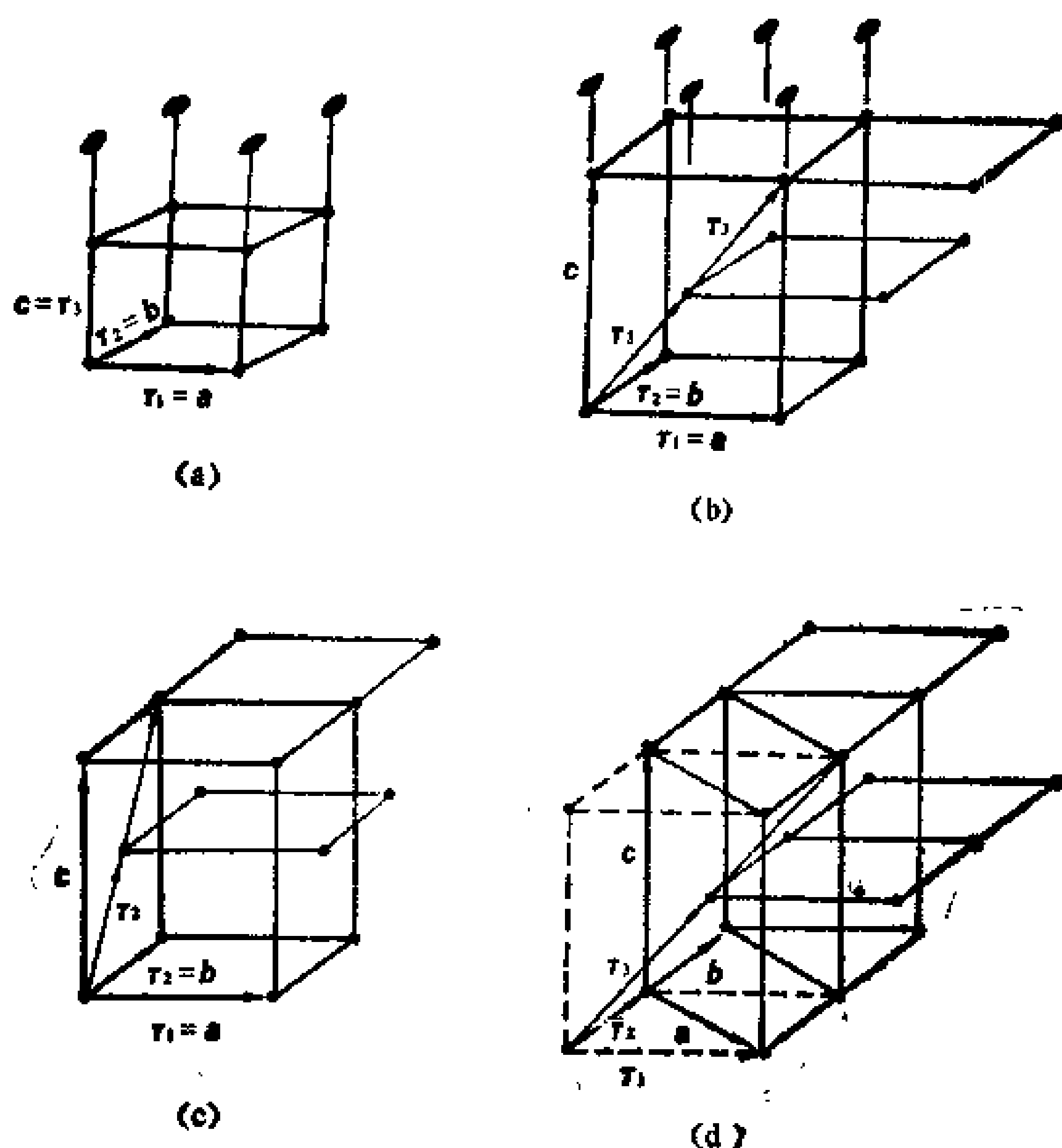


图 4-9　斜形平面点阵之间保持二次轴重合的扎结方式及它们构成的空间点阵阵胞（粗实线）

(a) 为四边形角处的二次轴重合；(b)(c) 为四边形角与边中心的二次轴重合；(d) 为四边形角与中心处的二次轴重合

因此，由斜形平面点阵可以构成三斜和单斜空间点阵。三斜点阵仅有原胞，无对称轴，有对称心，单斜点阵有原胞与底心复胞两种形式。单斜点阵仅在 c 轴方向有二次轴，复胞中的二次轴平

行于有心面。

（二）矩形平面点阵的扎结

矩形平面点阵之间保持二次轴的扎结方式与图 4-9 所示的情况相似，只是这时 $\boldsymbol{T}_1 \perp \boldsymbol{T}_2$. 同时，为了保持底面的矩形特征，不能采取图 4-9(d) 粗实线所示的方式取阵胞，而是取图 4-9(d) 中粗虚线所示的阵胞，即让 $\boldsymbol{T}_1 = \boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{T}_2 = \boldsymbol{b}$. 由此观之，矩形平面点阵扎结构成的空间点阵具有简单、底心和体心阵胞，它们的共同特点是 $a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$. 它们都具有分别沿 $\boldsymbol{a}$、$\boldsymbol{b}$、$\boldsymbol{c}$ 三个方向的二次轴，称具有这种对称特征的点阵为正交点阵。

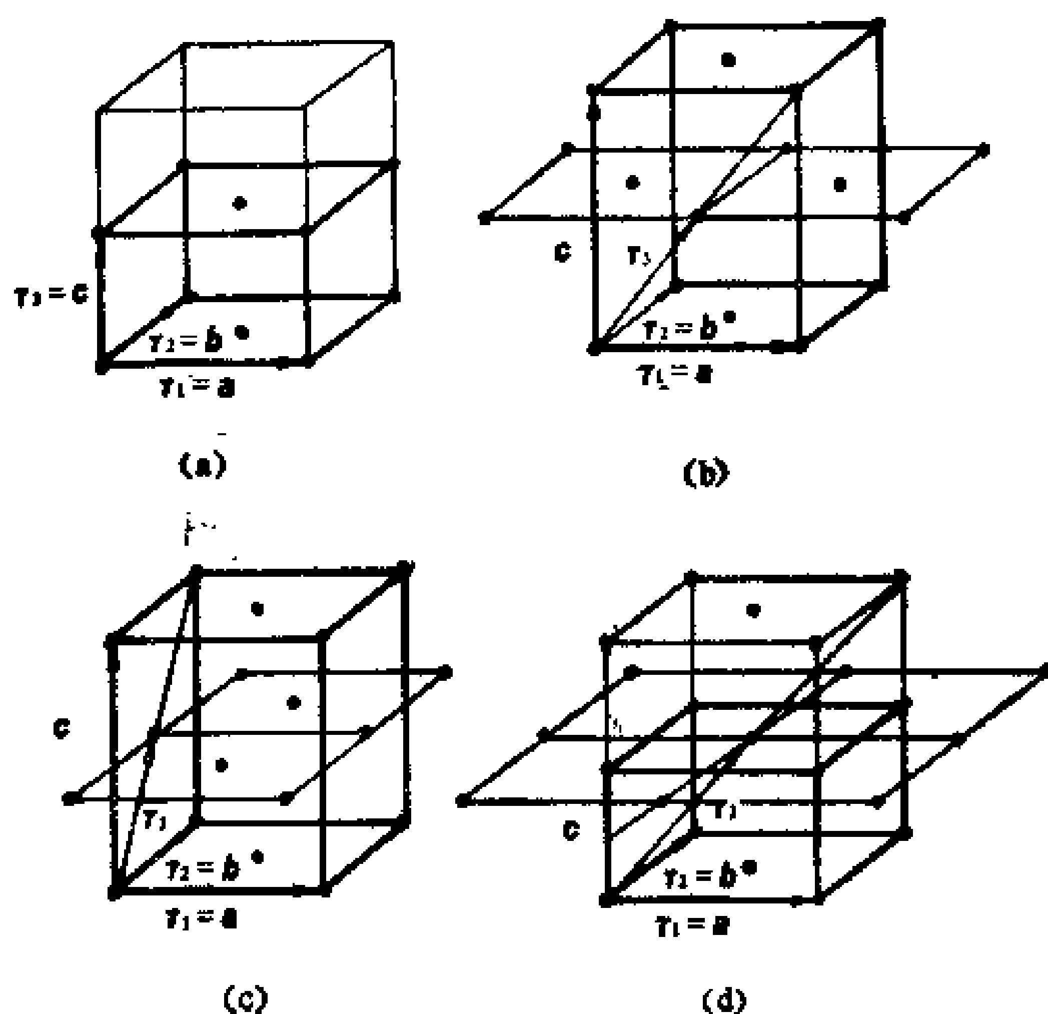


图 4-10　保证有心矩形平面点阵二次轴重合的 4 种扎结方式及它们所构成的空间点阵的阵胞（粗实线）
(a)、(d) 为底心正交阵胞，(b) (c) 为面心正交阵胞

图 4-10 给出有心矩形平面点阵的保持二次轴的扎结方式和它们构成的空间点阵阵胞（粗实线）。图中所示的 4 种方式与图 4-9 中的相似。空间点阵的对称特征与矩形平面点阵构成的空间点阵的相同，因此也是正交点阵。图 4-10(a)、(d) 所示的扎结方式形成底心阵胞，(b)、(c) 所示的扎结方式形成面心阵胞。

上述阵胞的取法并不是唯一的，但是其它的取法都会导致对称性降低，从而不能反映出正交点阵的对称特征。

（三）正方形平面点阵的扎结

回顾图 4-6(b) 所示的正方形平面点阵的对称特征，得知保证正方形平面点阵四次轴重合的空间扎结方式只有两种，即正方形角与角处的四次轴相重合，即图 4-11(a) 与 (b) 所示，和正方形角与中心处的四次轴相重合，即图 4-11(c) 所示。图 4-11(a) 与 (b) 分别表示 $T_1 = T_3$ 与 $T_1 \neq T_3$ 时的情况，它们对应的空间点阵阵胞分别为立方体与正方体。按图 4-11(c) 方式扎结而成的空间点阵为带体心的正方体。

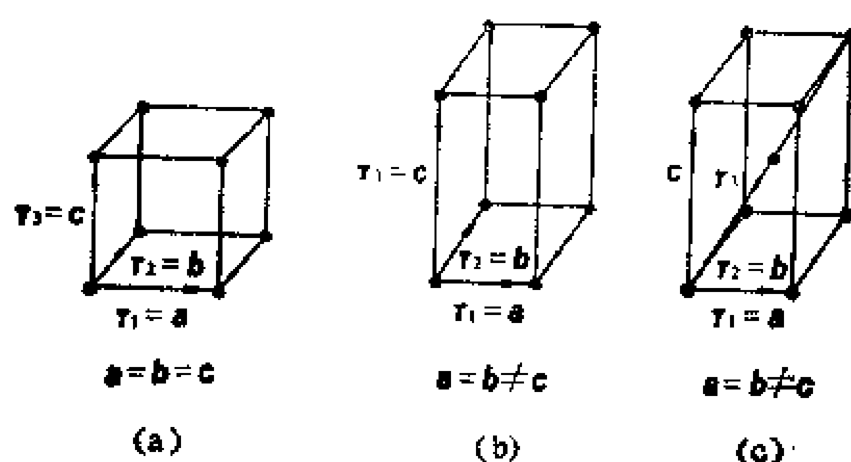


图 4-11 正方形平面点阵保证四次轴重合的扎结方式，其中 (a)、(b) 都是正方形角与角处四次轴重合，只是 (a) 中 $T_3 = T_1$，形成立方阵胞，(b) 中 $T_3 \neq T_1$，形成正方阵胞。(c) 为正方形角与中心处的四次轴重合，形成体心正方阵胞。

上述空间点阵中具有正方形阵胞者的对称特征是具有一个四次轴，称为正方点阵。

（四）三角形平面点阵的扎结

保证三角形平面点阵六次轴相互重合的扎结方式只有一种，如图 4-12 所示。所以取六棱柱形阵胞是为了表征其具有六次对称轴的对称特征。称这种空间点阵为六方点阵。

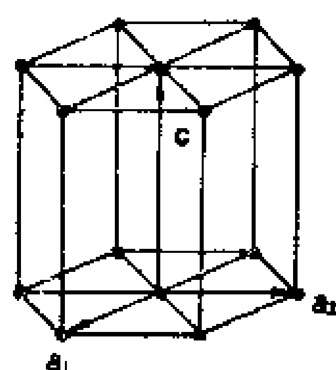


图 4-12 保证三角形平面点阵六次轴相互重合的扎结方式及它们所构成的空间点阵的阵胞，基矢为 a_1、a_2、c

图 4-13 是三角形平面点阵中保持有三次轴的空间扎结方式在点阵平面上的投影图。图中给出了三层三角形平面点阵，实际上第四层与第一层上的结点重合，第五层与第二层上的结点重合，第六层与第三层上的结点重合……。如果以 A、B、C 分别表示第一、二、三层平面点阵，则它们的扎结方式为 $ABCABC\cdots\cdots$。图中以“●”表示 A 层平面点阵中的结点位置，“○”表示 B 层平面点阵中的结点位置，“+”表示 C 层平面点阵中的结点位置。如果第一层到第四层平面点阵之间的垂直距离为 c，则“○”结点在 $1/3\,c$ 高度处，并且投影点落在 A 层点阵结点构成的倒三角形的重心；“+”在 $2/3\,c$ 高度处，并且投影点落在 A 层点阵结点构成的正三角形的重心。图中分别为第一、二、三、四层点阵标出了四个结点的投影位置，它们分别是 A_1、A_2、A_3、A_4；B_1、B_2、B_3、B_4；C_1、C_2、C_3、C_4 和 A_1'、A_2'、A_3'、A_4'。图中的 T_3' 为矢量 T_3 在平面 A 上的投影。

图 4-14 为与图 4-13 相对应的空间图形，其中各结点的名称与投影图中的相同。平面点阵间距为 h，图中粗实线所示为菱形阵胞，基矢为 b_1、b_2、b_3，它们之间的长度相等，两基矢间夹角为 α。c 轴为三次轴方向，菱形阵胞在三次轴方向的高度为 $3h$。平面

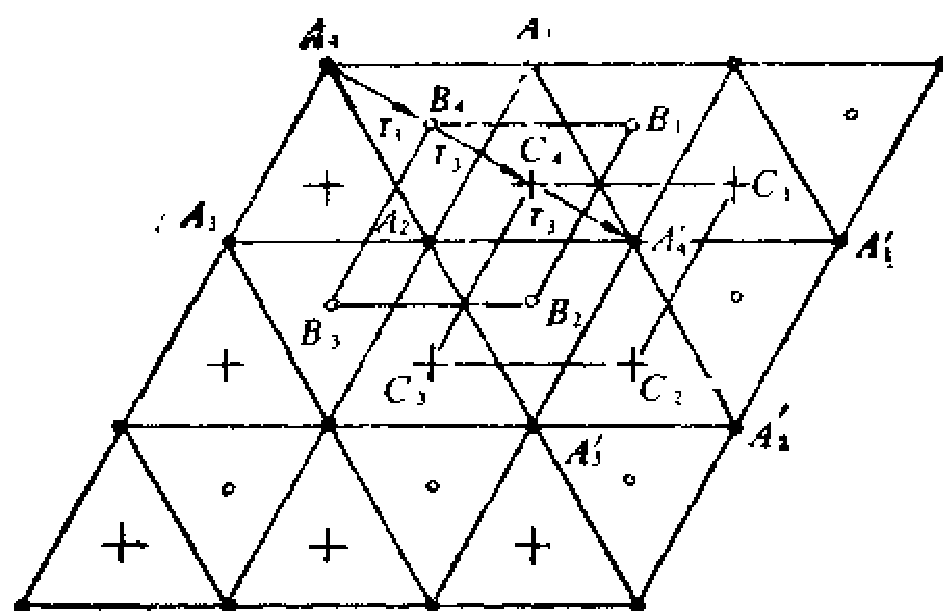


图 4-13　三角形平面点阵保持三次轴的扎结方式在点阵面上的投影图，其中"●"为第一层（A层）点阵上的结点位置；"○"为第二层（B层）点阵上结点位置在A层上的投影；"+"为第三层（C层）点阵上结点位置在A层上的投影。A_1、A_2、A_3、A_4；B_1、B_2、B_3、B_4；C_1、C_2、C_3、C_4和A_1'、A_2'、A_3'、A_4'分别为第一、二、三、四层点阵中结点的投影位置

点阵中的平行四边形边长为s，称此为菱形点阵。在图 4-14 中也可以取一个六棱柱复胞，基矢为 $\boldsymbol{a}_1$、$\boldsymbol{a}_2$、$\boldsymbol{c}$，$a_1 = a_2 = a$，图中给出的平行六面体就是该六方阵胞的 1/3。六方复胞将菱形原胞含在中间。应注意的是，这种六方复胞并不存在六次轴，只存在三次轴。在图 4-14 所示的菱形点阵中，层间距 h 与平行四边形边长 s 之间没有任何关系。

可以证明，当菱形点阵的 $h = s/\sqrt{6}$ 时，$\alpha = 90°$，其阵胞将呈现如图 4-15 所示的形式。它的三个基矢不但等长，而且相互垂直。这时，除沿 A_1、A_3' 方向具有三次轴外，沿 C_2B_4、C_3B_1 和 C_4B_2 方向也具有三次轴。称这种具有 4 个三次轴对称特征的点阵为立方点阵。自然，图 4-15 中所示的为立方阵胞。

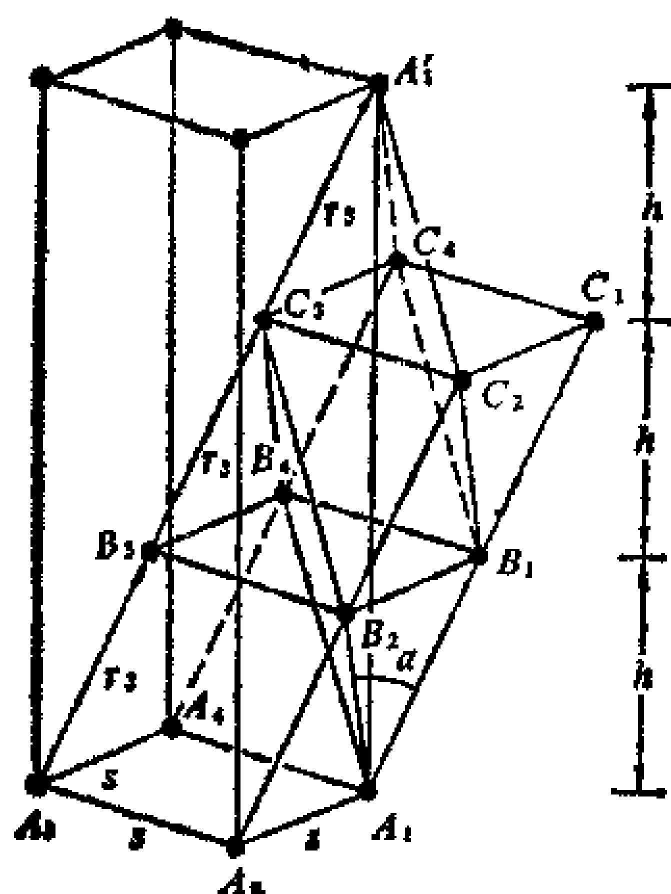


图 4-14 三角形平面点阵保持三次轴的扎结方式，粗实线所示为菱形原胞，基矢为 $\boldsymbol{b}_1$、$\boldsymbol{b}_2$、$\boldsymbol{b}_3$，基矢间夹角为 α 且 $b_1 = b_2 = b_3$；平行六面体为六方阵胞的一部分，其基矢为 $\boldsymbol{a}_1$、$\boldsymbol{a}_2$、$\boldsymbol{c}$，$a_1 = a_2 = s$．s 为平面点阵四边形边长，h 为平面点阵间距。$\boldsymbol{c}$ 为三次轴方向。$c = 3h$

此外，当 $h = 2s/\sqrt{6}$ 时，菱形阵胞中的基矢长度 $b = s$．这时，应在菱形点阵中取图 4-16 所示的面心立方阵胞，因为这样才能反映出点阵具有四个三次轴的对称特征．在此面心立方阵胞中，$s = 1/2\langle 110\rangle$，$3h = \langle 111\rangle$；当 $h = s/(2\sqrt{6})$ 时，三次轴方向的 AA_3 与基矢 b 等长，即 $3h = b$，$B_2B_1 = C_3C_4 = \cdots = s$，$\alpha = 109.47°$．这时应在点阵中取如图 4-17 所示的体心立方阵胞．图中以点画线（—·—）标出了 A_1 为体心的阵胞．从图中看出，菱形阵胞的三次轴在体心立方阵胞中应为 $\langle 111\rangle$ 方向，并且 $A_1A_3' = 1/2\langle 111\rangle$，同时 $b = 1/2\langle 111\rangle$，而且 $B_2B_1 = \cdots = s = \langle 110\rangle$．

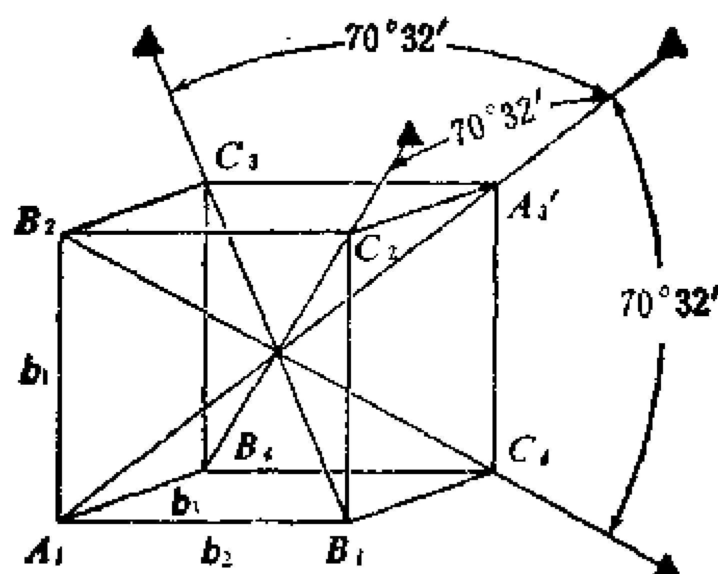


图 4-15 当 $h=s/\sqrt{6}$ 时，菱形阵胞中的 $\alpha=90°$，形成立方阵胞，出现新的三次轴，属立方点阵

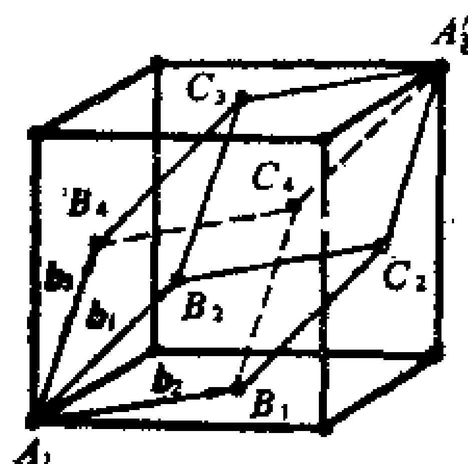


图 4-16 当 $h=2s/\sqrt{6}$ 时，菱形阵胞中的基矢 $b=s$，点阵取面心立方阵胞才能反映出其具有四个三次轴的对称特征

综上所述，将三角形平面点阵进行空间扎结，并使形成的空间点阵保持有三次轴时，则获得菱形空间点阵，一般取菱形阵胞，也有时取六方阵胞. 当菱形点阵中的

$$h=\frac{s}{\sqrt{6}}$$

$$h=\frac{2s}{\sqrt{6}}$$

图 4-17　当 $h = s/(2\sqrt{6})$ 时，菱形点阵中的基矢 $b = 3h$，点阵应取体心立方阵胞。点画线（—·—）标出 A_1 为体心的阵胞

$$h = \frac{s}{2\sqrt{6}}$$

时，取立方阵胞才能反应出点阵具有 4 个三次轴的对称特征，这时菱形点阵变态形成立方点阵。

（五）空间点阵小结

由于晶体对称性对晶体点阵的制约，使空间点阵的类型是有限的。布拉维首次证明了仅有 14 种空间点阵，故又称它们为布拉维点阵。表 4-3 综述了 14 种空间点阵与 5 种平面点阵的对应关系及它们的对称特征。

表 4-3 14种空间点阵与平面点阵之间的关系与它们的对称特征

平面点阵	扎结特点	空间点阵	对称特征
斜　形	不保持二次轴	三　斜	无
	保持二次轴	简单单斜 底心单斜	二次轴
矩　形	保持二次轴	简单正交 底心正交 体心正交 面心正交	三个相互垂直的二次轴
正方形	保持四次轴	简单正方 体心正方	一个四次轴
三角形	保持六次轴	六　方	一个六次轴
	保持三次轴	菱　形	一个三次轴
		简单立方 体心立方 面心立方	四个三次轴

四、7 个 晶 系

三维晶体都属于上述14种空间点阵。根据晶体的对称特征将

表 4-4 7 个晶系的最低对称要求

晶 系 名 称	最低对称要求
三　斜	无
单　斜	一个二次轴或一个对称面
正　交	三个相互垂直的二次轴
正　方	一个四次轴
六　方	一个六次轴
菱　形	一个三次轴
立　方	四个互成70°32′的三次轴

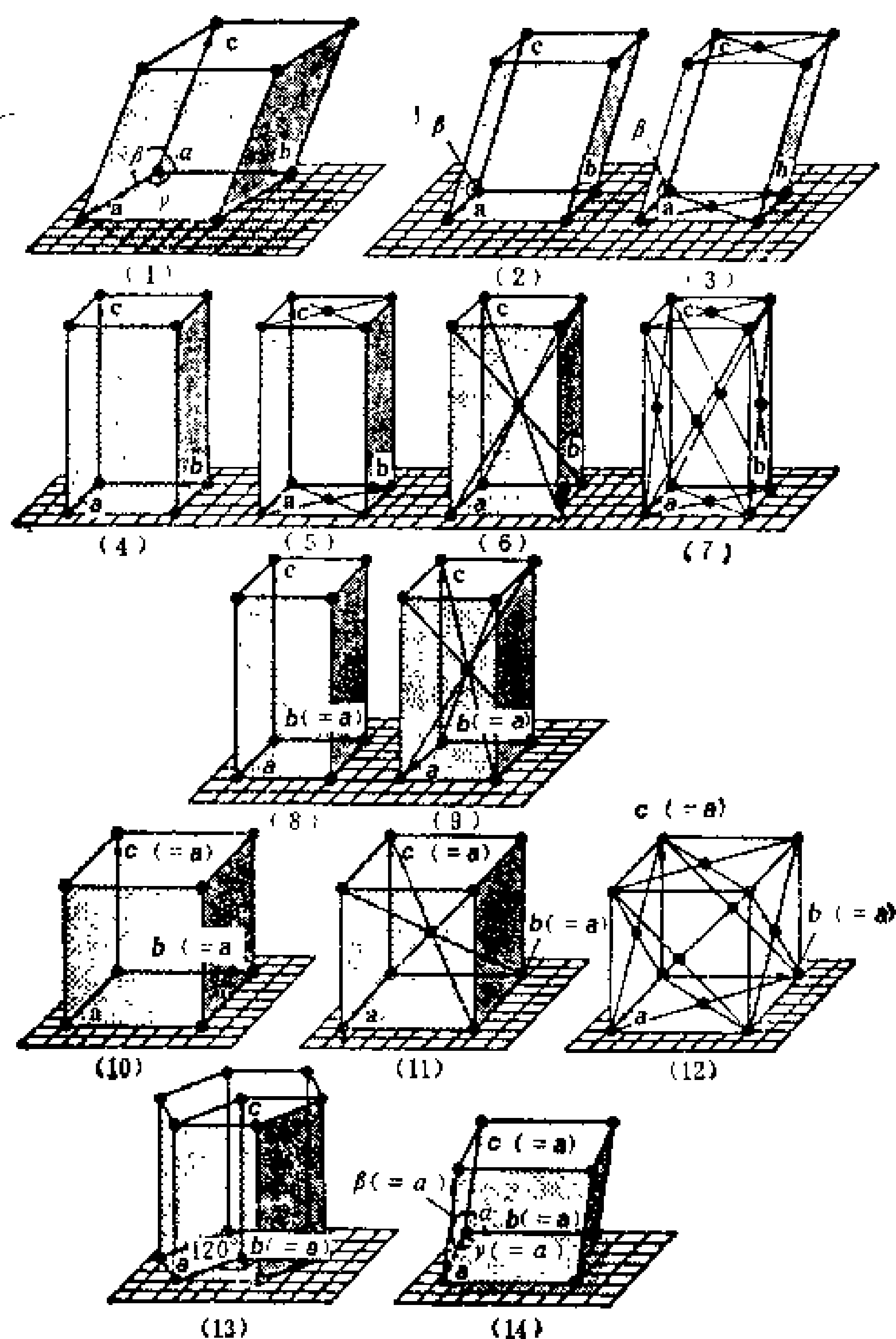


图 4-18　14 种布拉维点阵，P、C、I、F 为阵胞类型

(1) 三斜 P；(2) 单斜 P；(3) 单斜 C；(4) 正交 P；(5) 正交 C；(6) 正交 I；(7) 正交 F；(8) 正方 P；(9) 正方 I；(10) 立方 P；(11) 立方 I；(12) 立方 F；(13) 六方 P；(14) 菱形 P

表 4-5　7种晶系的晶胞外形

晶系名称	晶 胞 外 形 特 点
三　斜	$a \neq b \neq c \quad \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90°$
单　斜	$a \neq b \neq c \quad \alpha = \beta = 90°, \gamma \neq 90°$
正　交	$a \neq b \neq c \quad \alpha = \beta = \gamma = 90°$
正　方	$a = b \neq c \quad \alpha = \beta = \gamma = 90°$
六　方	$a = b \neq c \quad \alpha = \beta = 90°, \gamma = 120°$
菱　形	$a = b = c \quad \alpha = \beta = \gamma \neq 90°$
立　方	$a = b = c \quad \alpha = \beta = \gamma = 90°$

它们分成 7 个晶系。表 4-4 和表 4-5 分别给出 7 个晶系的最低对称要求和晶胞特征。图 4-18 给出了 14 种点阵的阵胞。由于菱形点阵也可以取六方阵胞，所以有时人们将六方系与菱形系合并统称为六方晶系，于是将 7 个晶系合并为 6 个晶系。但这时应注意的是，菱形与六方系的对称特征不同。

练　习　题

1. 请用图形证明三次轴不能与正方平面点阵结合。
2. 请用图形说明为什么没有立方底心阵胞。
3. 如果在菱形点阵中取六方阵胞，则阵胞中包含 9 个结点，如图 4-19 所示。请在此阵胞中勾画出菱形原胞。

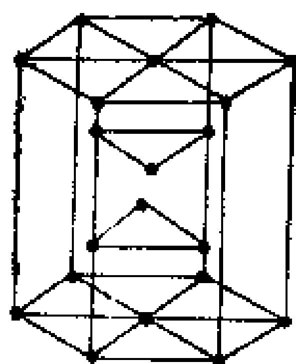


图 4-19　菱形点阵中的六方复胞

4. 请证明当菱形点阵中的 $h=s/(2\sqrt{6})$, $h=s/\sqrt{6}$, $h=2s/\sqrt{6}$ 时，分别取体心立方、简单立方、面心立方阵胞才能表示其点阵的对称特征。

复　习　题

1. 请说明平面点阵类型并绘出它们各自的阵胞。
2. 请列出 14 种布拉维点阵的名称，并绘出它们的阵胞。
3. 请说明 7 种晶系的名称及它们各自的最低对称性要求。

第五章　晶体的点群

一、点 群 概 念

几何形体或晶体的点群是它们所包含的全部宏观对称元素的总合．所以称之为点群，是由于这些宏观对称元素至少汇聚于一点．

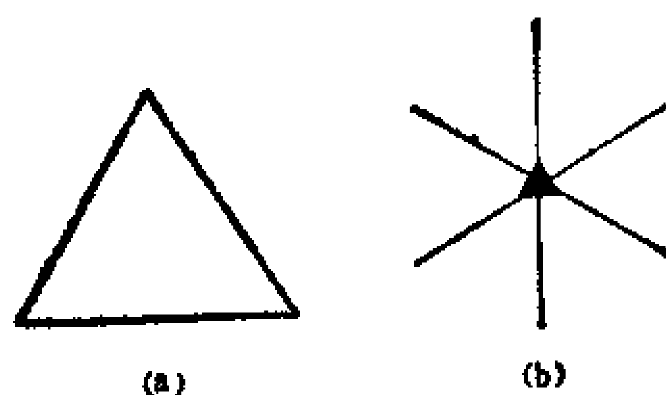


图 5-1　二维几何图形及其点群
(a) 正三角形；(b) 正三角形的点群

首先让我们具体地分析两个几何形体的点群． 图 5-1(a) 是二维几何图形，即正三角形．该三角形有一个过重心且垂直于纸面的三次轴、及 3 个分别过三角形的 3 个顶点和重心并垂直于纸面的对称面．这 4 个对称元素如图 5-1(b) 所示，汇聚于三角形的重心．图 5-1(b) 就是图 5-1(a) 的点群．用图 5-1(b) 所示的全部对称元素对图 5-1(a) 进行操作，此三角形的重心总是不

动的． 图 5-2 表示了立方体（a）及其具有的宏观对称元素类型(b)．图 5-2(b) 表明立方体(a)具有 6 个二次轴，3 个四次轴，4 个三次轴，9 个两种类型的对称面和 1 个对称心．图 5-3 给出该立方体宏观对称元素的局部综合，所有这些对称元素综合在一起，交于立方体的体心，构成立方体的点群．

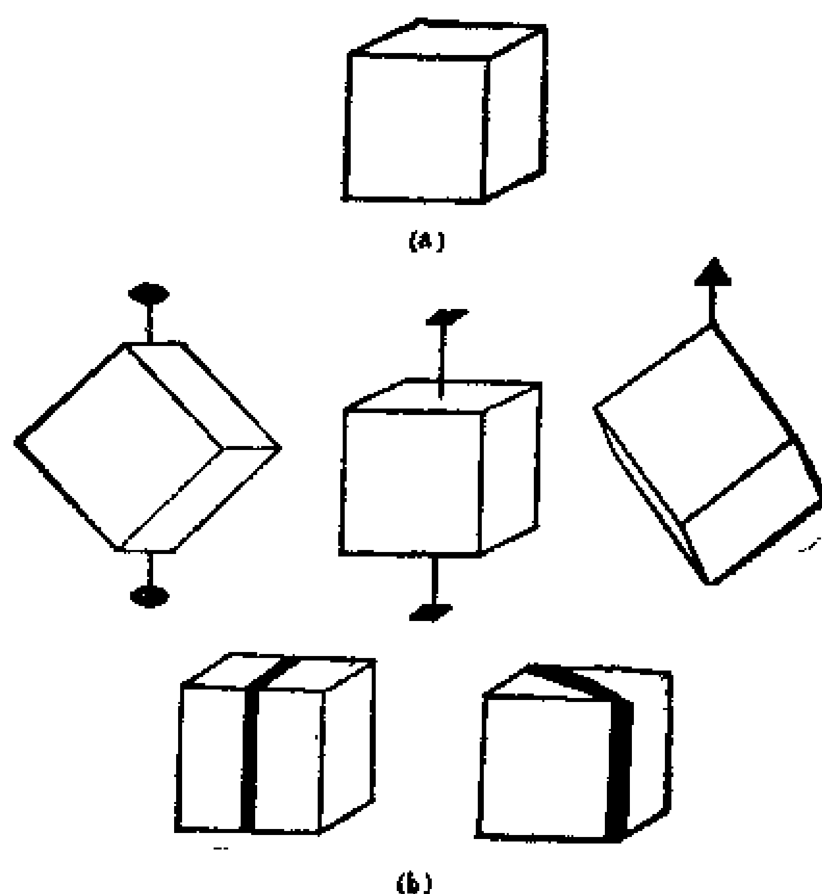


图 5-2　三维几何图形及其包含的对称元素
（a）立方体；（b）立方体中的对称元素

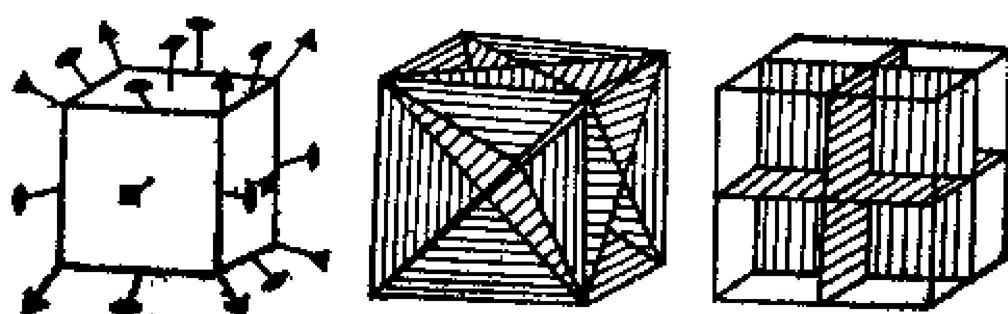


图 5-3　立方体的宏观对称元素的局部综合

几何形体的点群种类无限，而晶体的点群要受晶体结构周期性重复的制约，只有 32 种．这里不去描述点群类型的推导过程，而是着重于点群概念及其应用．

二、点群及其符号

对于二维晶体，仅有垂直于晶面的 1、2、3、4、5、6 次轴和对称面 m．这 6 种宏观对称元素相互组合，仅能构成 10 种二维晶体学点群．表 5-1 中给出这 10 种二维晶体学点群的图形与国际符号．在点群的国际符号中，对称轴在前，对称面在后．如符号 $2mm$ 表示点群由一个二次轴和两个相互垂直的对称面构成．

根据点群的定义，用简单的作图可以证明不会存在 $4m$ 和 $6m$ 点群．

对于三维晶体，宏观对称元素 1、2、3、4、5、6、m、i 和 $\bar{4}$ 本身，以及它们之间相互结合，仅能构成 32 种点群[注]．表 5-2 中给出这 32 种点群的国际符号、熊夫利斯符号及它们所属的晶系．表 5-3给出点群的国际符号中所用的对称元素相对于阵胞棱的取向．当对称元素为对称轴时，表中所示的方向与轴向一致，当对称元素为对称面时，表中所示方向与面垂直．如果某一方向同时存在 n 次轴与对称面 m，则写成 n/m． 如 $2/m\,2/m\,2/m$ 点群由图 5-4 所示．点群的熊夫利斯符号规定方法如下：仅由一个转轴组成的点群是迴转群，记为 C_n，字母 C 的角标为转轴的轴次；点群具有 n 次轴及与其垂直的二次轴时是双面群，记为 D_n；T 代表四面体对称性；O 代表八面体对称性；S_n 代表 n 次反轴；C_s 代表对称面；右下角的小字母 i 代表对称心；h 代表与轴垂直的对称面；v 代表与轴平行的对称面，d 代表平分两个转轴的对称面．

注：需要时请参看本书所列的参考书目（4）、（8）．

表 5-1　10 种二维晶体学点群

对称操作	二维晶体学点群	国际符号
一个一次轴		1
一个二次轴		2
一个镜面		m
一个二次轴，二个镜面		2 mm
一个三次轴		3
一个三次轴，一个镜面，此面以轴操作又产生两个镜面		3 m
一个四次轴		4
一个四次轴，两个互为45°的镜面，转动后形成其它镜面		4 mm
一个六次轴		6
一个六次轴，两个互为30°的镜面		6mm

表 5-2　32种点群及其符号

晶　系	国　际　符　号		熊夫利斯符号
	全　写	缩　写	
三　斜	1	1	C_1
	$\bar{1}$	$\bar{1}$	C_i
单　斜	m	m	C_s
	2	2	C_2
	$2/m$	$2/m$	C_{2h}
正　交	$2mm$	mm	C_{2v}
	222	222	D_2
	$2/m\ 2/m\ 2/m$	mmm	D_{2h}
正　方	$\bar{4}$	$\bar{4}$	S_4
	4	4	C_4
	$4/m$	$4/m$	C_{4h}
	$\bar{4}2m$	$\bar{4}2m$	D_{2d}
	$4mm$	$4mm$	C_{4v}
	422	42	D_4
	$4/m\ 2/m\ 2/m$	$4/mmm$	D_{4h}
菱　形	3	3	C_3
	3	3	C_{3i}
	$3m$	$3m$	C_{3v}
	32	32	D_3
	$32/m$	$3m$	D_{3d}
六　方	$\bar{6}$	$\bar{6}$	C_{3h}
	6	6	C_6
	$6/m$	$6/m$	C_{6h}
	$\bar{6}2m$	$\bar{6}2m$	D_{3h}
	$6mm$	$6mm$	C_{6v}
	622	62	D_6
	$6/m\ 2/m\ 2/m$	$6/mmm$	D_{6h}
立　方	23	23	T
	$2/m3$	$m3$	T_h
	$\bar{4}3m$	$\bar{4}3m$	T_d
	432	43	O
	$4/m\ 32/m$	$m3m$	O_h

表 5-3　点群国际符号顺序与晶系的关系

晶　系	点群符号的位置		
	第一个	第二个	第三个
三斜晶系	晶体中的所有方向		
单斜晶系	a 轴或 b 轴		
正交晶系	a 轴	b 轴	c 轴
正方晶系	c 轴	a 轴或 b 轴	$a+b$
菱形和六方晶系	c 轴	a 轴	$2a+b$
立方晶系	a 轴	$a+b+c$	$a+b$

点群的国际符号，反映出点群中在一个(三斜或单斜晶系)或几个特殊方向存在的宏观对称元素．于是，能够从点群的国际符号推断该点群的全部对称元素．例如立方晶系的 $4/m\bar{3}2/m$ 点群，表示其在〈100〉方向有四次轴和与轴垂直的对称面，〈111〉方向存在三次反轴，〈110〉方向有二次轴和与轴垂直的对称面．这就反映出该点群具有 3 个四次轴，6 个二次轴，4 个三次轴，9 个对称面和 1 个对称心(图 5-3)．

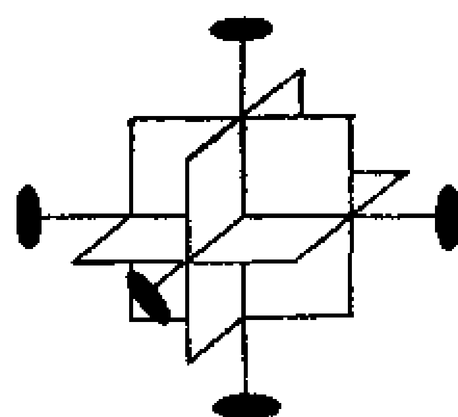


图 5-4　点群 $2/m\,2/m\,2/m$

表 5-4 是用极射投影[注1]表示的 32 种点群，注明了它们所属的晶系和国际符号．表中一般包括了等价方向迹点[注2]的极射投影(左图)和对称元素的极射投影(右图)，粗实线为对称面．如果已知某点群的国际符号，就可以利用此表查到其全部宏观对称元素．

晶体点群所代表的对称性，在晶体的弹性模量、热膨胀、热导、

注 1：有关极射投影的定义请见第八章．

注 2：迹点是方向的极射投影点．

表 5-4　32 种点群

三斜	单斜	正方
1	2	4
—	m(=$\bar{2}$)	$\bar{4}$
$\bar{1}$	$2/m$	$4/m$
单斜	**正交**	
2	222	422
m	$2mm$	$4mm$
—	—	$\bar{4}2m$
$2/m$	mmm	$4/mmm$

续表 5-4

菱形	六方	立方
3	6	23
—	$\bar{6}$	—
$\bar{3}$	$6/m$	$m3$
32	622	432
$3m$	$6mm$	—
—	$\bar{6}m2$	$\bar{4}3m$
$\bar{3}m$	$6/mmm$	$m3m$

压电性、热电性、光弹性等物理性质，及晶体生长速度、腐蚀速度等化学性质中都有反映。晶体的X光、电子、中子等的衍射图样，则直接与晶体的对称性相关。

下面就有关点群的几个问题作进一步阐述。

三、点群与形

晶体中，由点群所联系的面是等价面，称这些面为形。这里的“形”并非形状，而是一种术语，晶体的形与晶体的外形密切相关。

利用极射投影，可以方便地表示晶体形中各面的分布。极射投影中，任何不在对称元素上的极点，经点群中全部对称元素操作后，所获得的极点分布是一般形中面的分布；如果极点[*]处在对称元素上，则所获得的极点分布是特殊形中的面分布。

现在以立方晶系的 Al 和 AuBe 为例，说明它们的一般形和特殊形。

（一）Al 晶体的一般形与特殊形

Al 属立方晶系，点群是 $m\bar{3}m$，图 5-5 为其点群的极射投影图。(123) 面极点不在任何对称元素上，此极点经点群中全部对称元素操作，能获得 48 个极点。图 5-5 只给出了八分之一象限内的极点，由“●”所示。由这 48 个面所构成的形，就是 Al 晶体的一般形，它是如图 5-6 所示的四十八面体，称为 {123} 形。(112) 面极点处在一个对称面上，它经点群中全部对称元素操作后，形成 24 个极点，图 5-5 中的“▲”为一个象限内的 {112} 极点，{112} 面形为图 5-7(e) 中的二十四面体。称这种由在对称元素上的面构成的形为特殊形。用相同的方法可以获得 {100}、{111}、{110}、

注：极点是面的极射投影点。

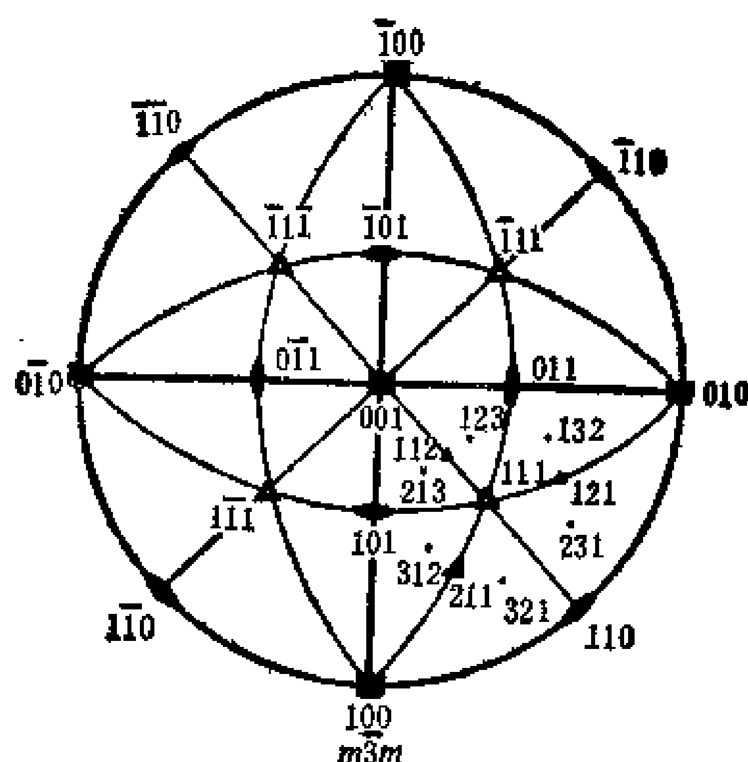


图 5-5 Al 的点群及 {123} 一般形("●")和特殊形 {112}(▲)的极射投影，粗实线为对称面

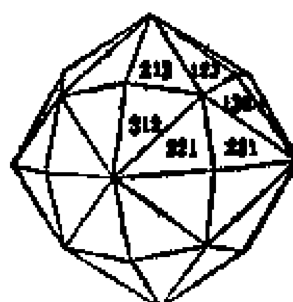


图 5-6 Al 的 {123} 一般形的形状——四十八面体

{120}、{221} 等特殊形，上述几种典型的特殊形的形状，由图 5-7 所示。

表 5-5 给出 $m\bar{3}m$ 点群所对应的几种形中的晶面数目。

表 5-5 属 $m\bar{3}m$ 点群的几种形中所包含的晶面数目

形的名称	{hkl}	{hhl}	{hk0}	{hh0}	{hhh}	{h00}
晶面数	48	24	24	12	8	6

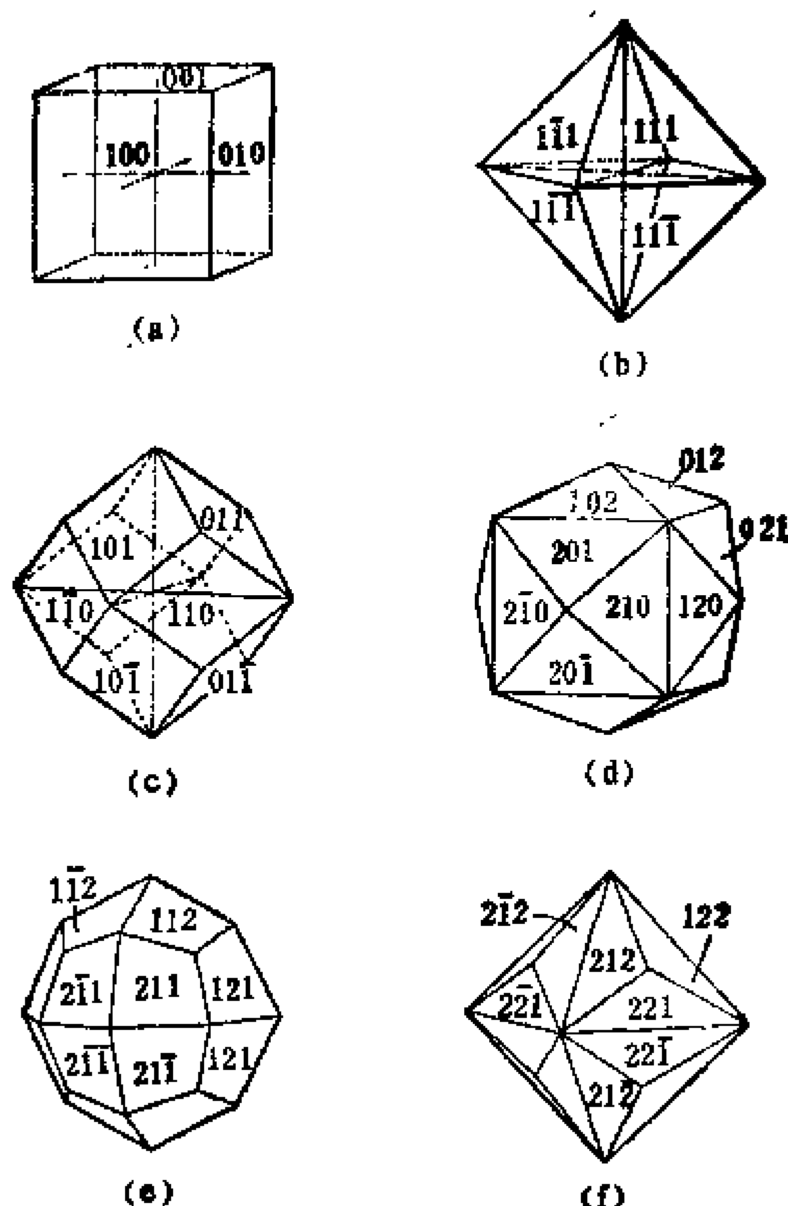


图 5-7 $m\bar{3}m$ 点群的几种典型特殊形

(a) {100} 形，立方体；(b) {111} 形，八面体；(c) {110} 形，十二面体；(d) {120}形，二十四面体；(e) {112}形，二十四面体；(f) {221} 形二十四面体

(二) AuBe 晶体的一般形与特殊形

AuBe 晶体为立方系，属 23 点群，图 5-8 是其点群的极射投影图，图中还给出了一般形 $\{hkl\}$ 的极点，"●"为在图正面的极点，"○" 表示在图背面的极点。图中的"×"与"△"为特殊形 {112}

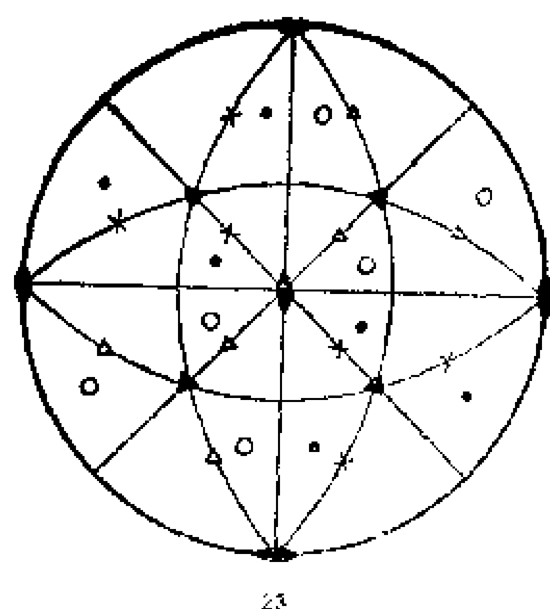


图 5-8 AuBe 的点群和一般形 {hkl} 的极点"●"(在图的正面)、"○"(在图的背面)与特殊形 {112} 的极点,"×"、"△"分别表示它们在图的正面与背面

的极点,它们分别在图的正面和背面. 图 5-9 给出 23 点群对应的一般形与特殊形图形. 表 5-6 给出该点群各种形包含的晶面数.

表 5-6 23 点群中各种形所包含的晶面数

形的名称	{hkl}	{hhl}	{hk0}	{hh0}	{hhh}	{h00}
晶面数	12	12	12	12	4	6

(三) 晶体的自然外形

发育良好的晶体,其外形往往是由一个或少数几个形的面构成,所以它们呈现出美丽而规则的外形,图 5-10 是 $Y_3Fe_5O_{12}$ 晶体的照片. 因此,由晶体的自然外形,可能判断它的点群对称性,从而确定其所属的晶系.图 5-11 示意了 $CaCO_3$ 晶体的自然外形,可以判断它的点群为 $\bar{3}\,2/m$, 即属六方晶系.

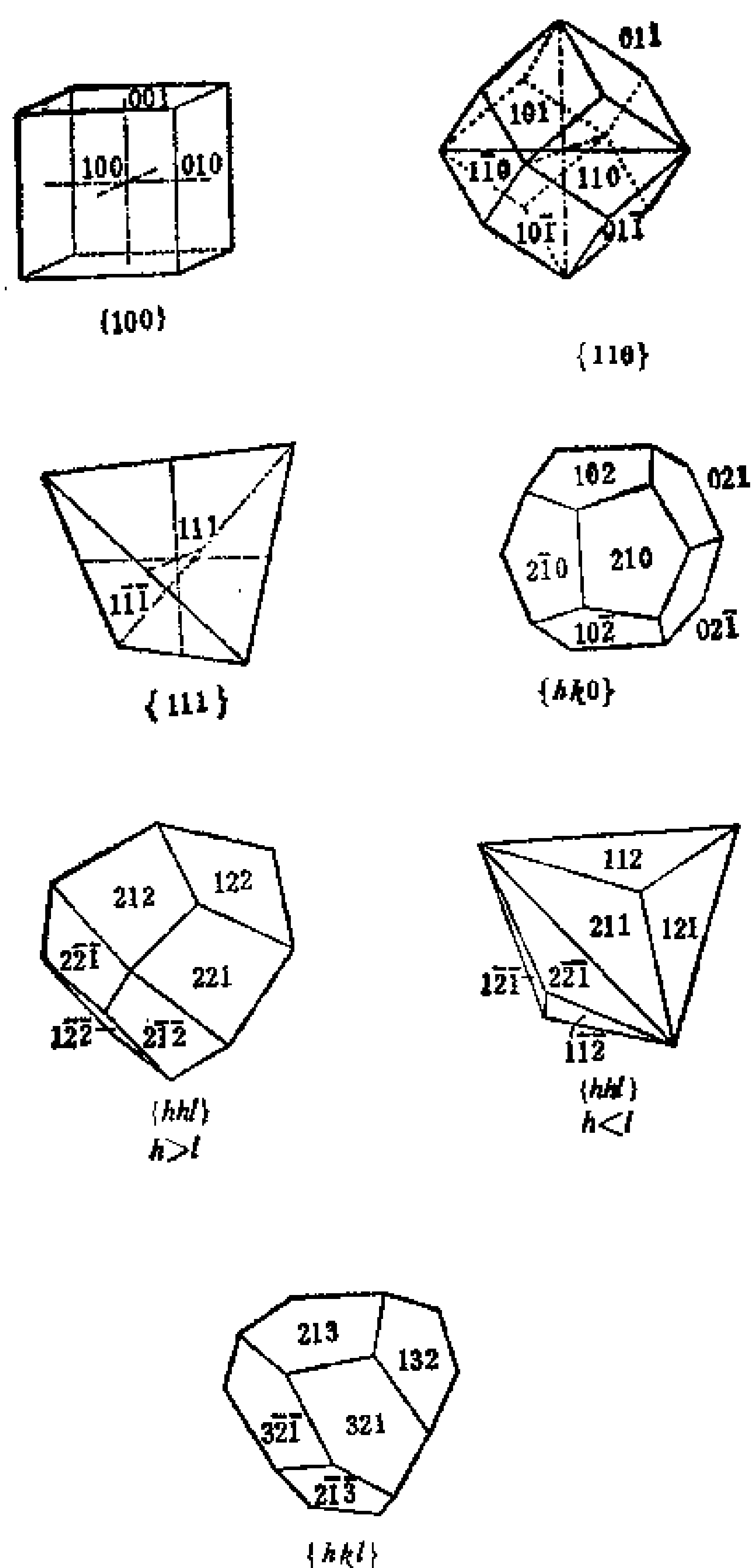


图 5-9　23 点群的 {100}、{110}、{111}、{hk0}、{hhl} 其中 h>l、{hhl} 其中 h < l 和 {hkl} 形

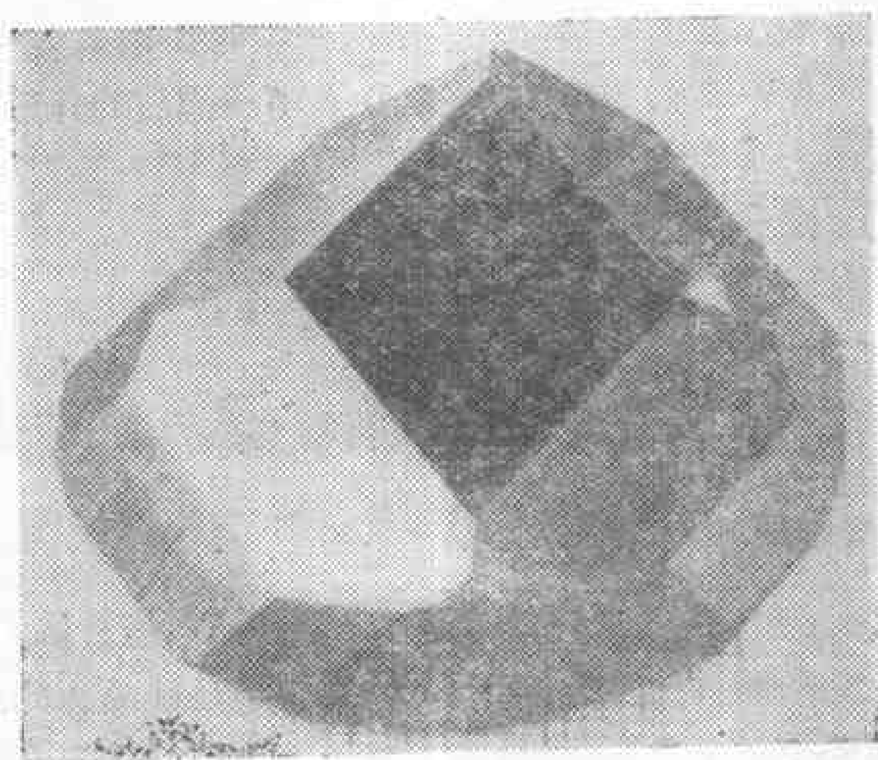


图 5-10　$Y_3Fe_5O_{12}$ 晶体的美丽而规则的外形



图 5-11　$CaCO_3$ 晶体可能呈现的外形之一，它由 M 和 e 两个形构成. 属于 $\bar{3}\,2/m$ 点群，六方晶系

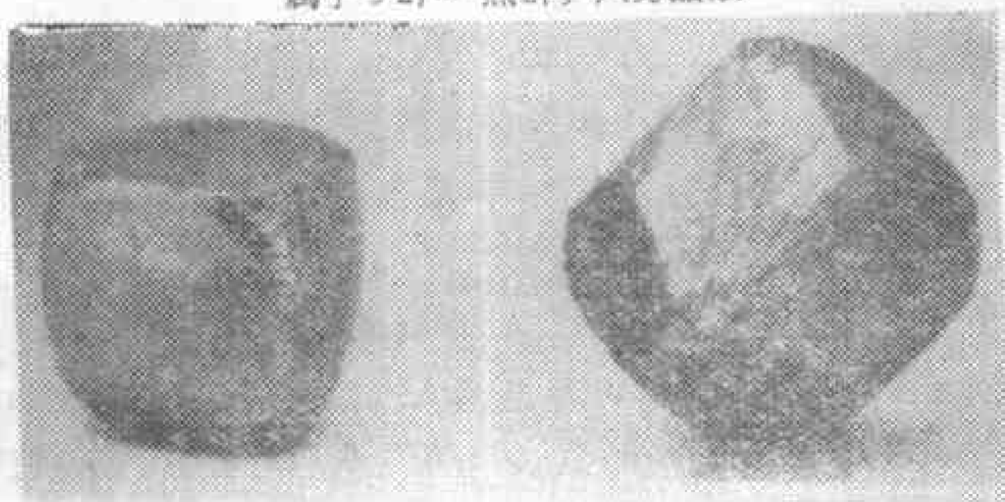


图 5-12　球形 Ge 在腐蚀液中浸泡一段时间后的外形，两者都表现出有 $4/m\bar{3}\,2/m$ 点群

制成球形的晶体，浸泡在腐蚀液中，一段时间后也会呈现出规则的外形. 图 5-12 是球形 Ge 在腐蚀液中浸泡后的外形. Ge 的点群是 $4/m\bar{3}\,2/m$，为立方晶系.

四、劳埃群与重复因数

劳埃群与重复因数都是与晶体的衍射有关的晶体学特征.

（一）劳埃群

由于X光衍射不能区分正、反两种晶面，即不能分辨 (hkl) 和 $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$，因此衍射图样的对称性并不能真实地反映晶体的对称性，而是给晶体附加了对称心. 于是人们将所有点群都加上对称心，从而获得 11 种与衍射图样相对应的对称群，称此为劳埃群. 表 5-7 给出 11 种劳埃群与 32 种点群的对应关系. 同时，在衍射工作中所涉及的形，都是指由劳埃群所联系的面.

（二）重复因数

重复因数是衍射工作中所用的术语，它是指由劳埃群所联系的形中所包含的晶面数， 例如劳埃群 $m\bar{3}m$ 的 $\{100\}$ 形中包含 6 个晶面，则对于具有 $m\bar{3}m$ 劳埃群的晶体，$\{100\}$ 面的重复因数是 6. 这里指的是粉末（多晶）衍射中的重复因数. 表 5-8 给出粉末衍射时对应各晶系的不同形的重复因数. 表中带“*”号的数字表示的是该重复因数是由晶面距相等、晶面指数相似、分属于几个形的面的面数组成. 下面举例说明.

例 1：立方晶系的晶体 AuBe 的重复因数

前面谈到，AuBe 晶体的点群为 23，因此其劳埃群为 $m3$. 图 5-13 是劳埃群 $m3$ 的极射投影图，粗实线表示对称面，其他符号的意义同前. 图中给出了由劳埃群 $m3$ 联系的一般形 $\{123\}$ 的极点.

表 5-7 11 种劳埃群与 32 种点群

晶系	点群符号		一般形中晶面数	劳埃群
	国际符号	熊夫利斯符号		
三斜	1	C_1	1	$\bar{1}$
	$\bar{1}$	C_i	2	
单斜	2	C_2	2	$2/m$
	m	C_s	2	
	$2/m$	C_{2h}	4	
正交	mm	C_{2v}	4	mmm
	222	D_2	4	
	mmm	D_{2h}	8	
正方	4	C_4	4	$4/m$
	$\bar{4}$	S_4	4	
	$4/m$	C_{4h}	8	
	$4mm$	C_{4v}	8	$4/mmm$
	$\bar{4}2m$	D_{2d}	8	
	42	D_4	8	
	$4/mmm$	D_{4h}	16	
三方 六方	3	C_3	3	$\bar{3}$
	$\bar{3}$	C_{3i}	6	
	$3m$	C_{3v}	6	$\bar{3}m$
	32	D_3	6	
	$\bar{3}m$	D_{3d}	12	
	6	C_6	6	$6/m$
	$\bar{6}$	C_{3h}	6	
	$6/m$	C_{6h}	12	
	$6mm$	C_{6v}	12	$6/mmm$
	$\bar{6}m2$	D_{3h}	12	
	62	D_6	12	
	$6/mmm$	D_{6h}	24	
立方	23	T	12	$m3$
	$m3$	T_h	24	
	$\bar{4}3m$	T_d	24	$m3m$
	43	O	24	
	$m3m$	O_h	48	

“●”表示极点在图的正面，“○”表示极点在图的背面．{123}形中包含 24 个面．图 5-13 中“+”表示的 213、132、321……，不属于{123}形，而是属于{213}形，同样包含 24 个晶面，如图 5-15(a)所示．{213}形与{123}形中的面间距相等，但面上的原子分布不同．

表 5-8　粉末衍射中的重复因数

重复因数 \ 形名称 / 晶系	*hkl*	*hhl*	*h0l*	*0kl*	*hk0*	*hh0*	*hhh*	*00l*	*0k0*	*h00*
三　斜	2		2	2	2			2	2	2
单　斜	4		2	4	4			2	2	2
正　交	8		4	4	4			2	2	2
正　方	16*	8	8		8*	4		2	4	
三方、六方	24*	12*	12*		12*	6		2	6	
立　方	48*	24	24*			12	8	6		

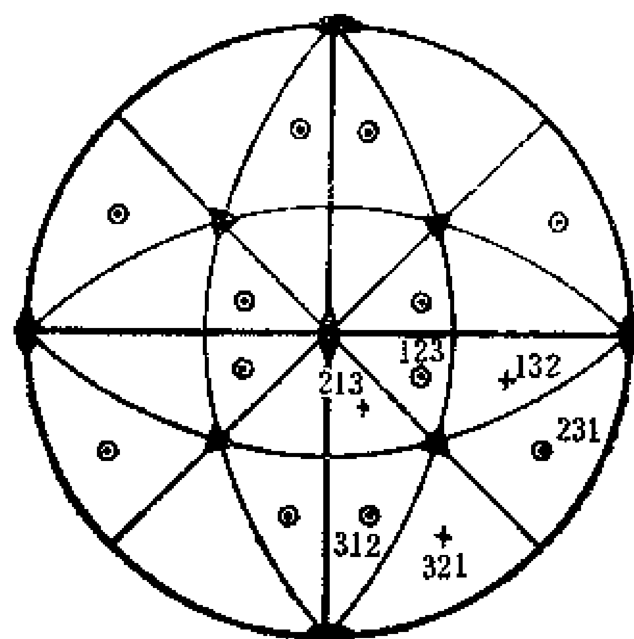


图 5-13　$m3$ 劳埃群，粗实线为对称面，一般形{123}的极点为“●”(在图的正面)，“○”(在图的背面)，一般形{213}的部分极点用“+”表示

图 5-14 给出{012}形的极点分布，包含 12 个面．由图中的"●"与"○"表示，它们的意义同于图 5-13，同时，图中也给出了部分{021}形的极点，由"×"表示，{021}形也包含 12 个面，构成如图 5-15(b) 所示的十二面体． {012}和{021}形与{123}和{213}形的情况相似，即它们的面间距相同，但面上的原子分布不同．

例 2：六方晶系晶体的重复因数

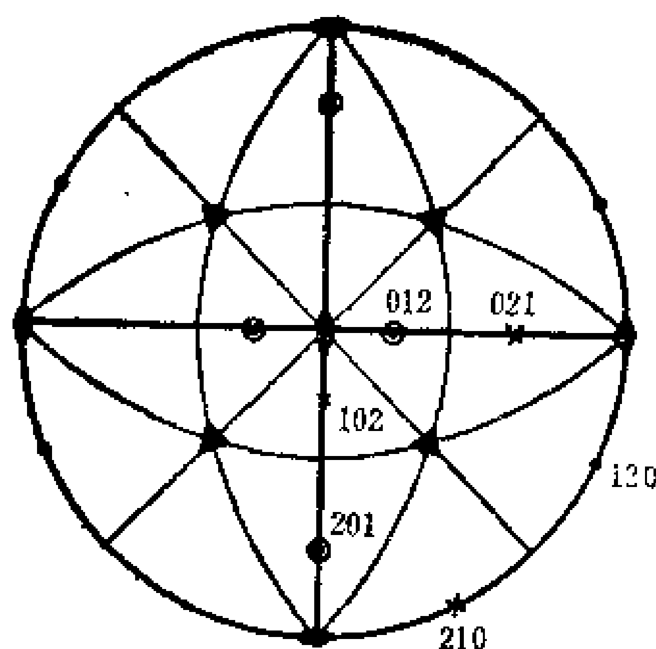


图 5-14 $m3$ 劳埃群及特殊形 {012} 的极点，"●"表示极点在图的正面，"○"表示极点在图的背面，并给出了部分 {021} 形的极点，"×"

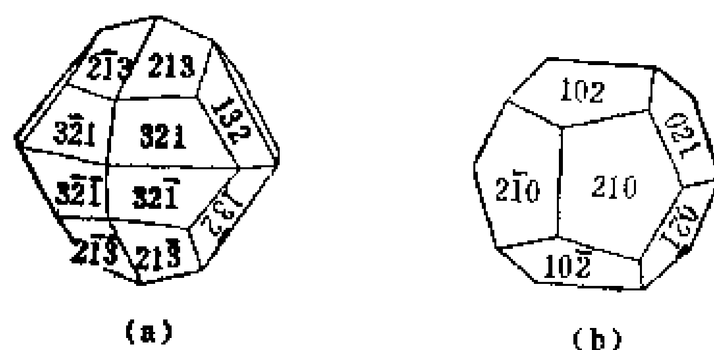


图 5-15 $m3$ 劳埃群的形

(a) {213} 形； (b) {021} 形

图 5-16 给出了六方晶系（包含菱形晶系）所具有的 4 种劳埃群及由其所联系的一般形的极点．图中各种符号的意义与以前各图的说明相同．表 5-9 给出这 4 种劳埃群所联系的一般形与特殊形中所包含的晶面数目，面间距相等的形的数目和重复因数．这里的重复因数是指某指数为 *hki* 正负全排列 ±*l* 的晶面总数．

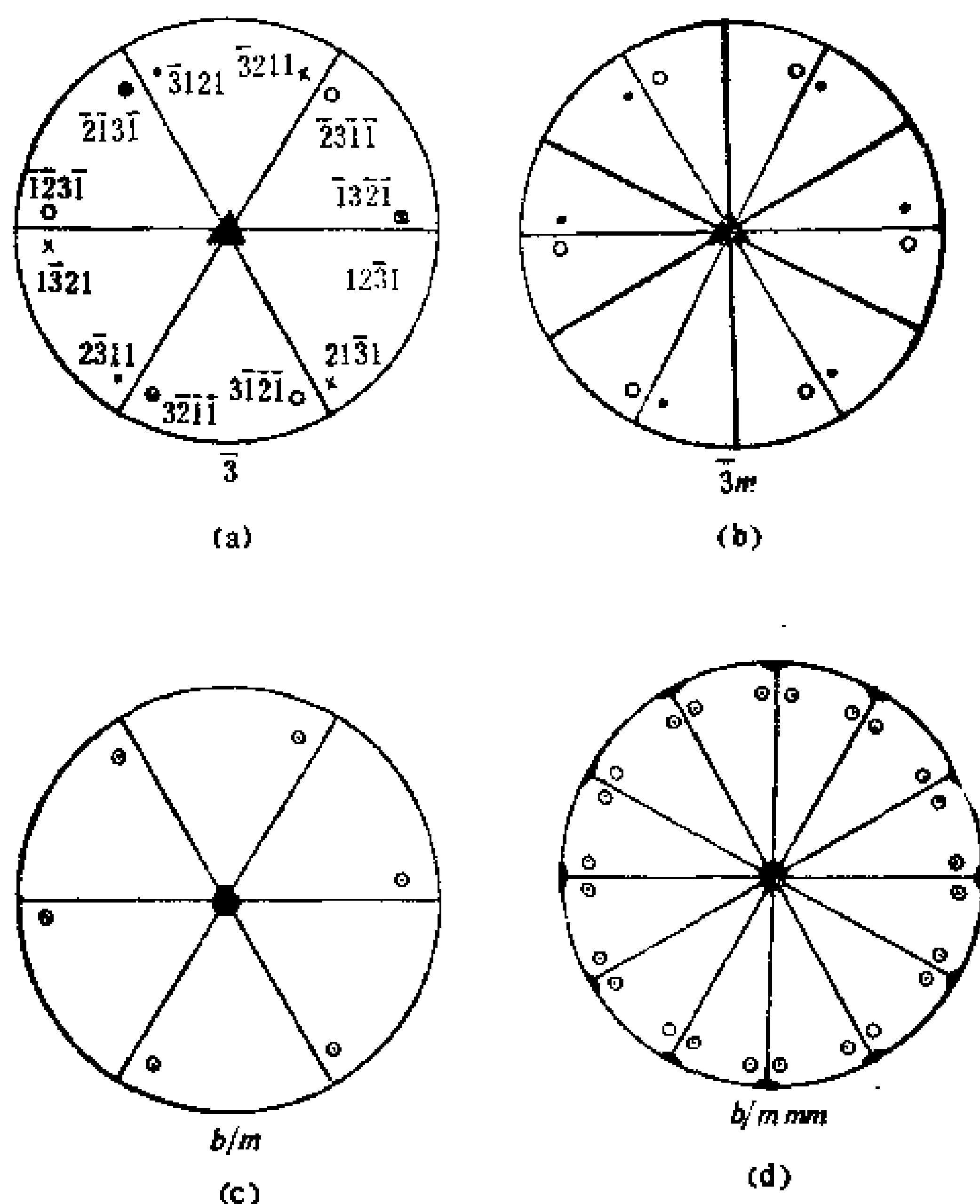


图 5-16　属六方晶系的劳埃群及一般形中各面的极射投影，粗实线表示对称面，"●"与"○"分别表示极点在图的正面与背面，"×"与"⊗"意义与"●"与"○"相同，只是表示不同形的极点

表 5-9　属六方晶系的各种劳埃群所对应的重复因数

劳埃群	形的名称	hkl	hhl	$0kl$ $h0l$	$hk0$	$hh0$	$00l$	$h00$ $0k0$
$\bar{3}$	形内晶面数	6	6	6	6	6	2	6
	面间距相等的形数	4	2	2	2	1	1	1
	重复因数	24	12	12	12	6	2	6
$\bar{3}m$	形内晶面数	12	6	12	12	6	2	6
	面间距相等的形数	2	2	1	1	1	1	1
	重复因数	24	12	12	12	6	2	6
$6/m$	形内晶面数	12	12	12	6	6	2	6
	面间距相等的形数	2	1	1	2	1	1	1
	重复因数	24	12	12	12	6	2	6
$6/mmm$	形内晶面数	24	12	12	12	6	2	6
	面间距相等的形数	1	1	1	1	1	1	1
	重复因数	24	12	12	12	6	2	6

劳埃群 $\bar{3}$ 中的 $\{12\bar{3}1\}$ 一般形，图 5-16(a) 中的“●”与“○”，只包含 6 个晶面，即：$(12\bar{3}1)$、$(\bar{3}121)$、$(2\bar{3}11)$ 和 $(\bar{1}\bar{2}3\bar{1})$、$(3\bar{1}\bar{2}\bar{1})$、$(\bar{2}3\bar{1}\bar{1})$。上述 6 个面可以简写成 $12\bar{3}$↴ $+ 1$ 和 $\bar{1}\bar{2}3$↴ $- 1$。符号“↴”表示数字改变顺序的方向。如 $12\bar{3}$↴ 表示 $12\bar{3}$、$\bar{3}12$ 和 $2\bar{3}1$ 三种情况。与上述形晶面指数相似，面间距相等的形还有 $21\bar{3} + 1$ 与 $\bar{2}\bar{1}3 - 1$，图 5-16(a) 中的“×”、“⊗”；$12\bar{3} - 1$ 与 $\bar{1}\bar{2}3 + 1$；$21\bar{3} - 1$ 与 $\bar{2}\bar{1}3 + 1$ 三个形。

五、三维点群与二维点群

三维晶体的宏观对称性用三维点群表示．三维晶体在某面上的投影，或垂直某方向作截面，都构成二维晶体，它们的对称性应用二维点群来表示．表 5-10 和 5-11 分别说明了三维点群中的对称元素在投影和截面时的变化。

表 5-10　三维点群作投影时对称性的变化

三维点群中的对称元素	对称元素与投影面的关系	二维点群中反应的对称性
n 次轴	垂　直	n 次轴
偶次轴	平　行	对称面
奇次轴	平　行	无
对称面	垂　直	对称面
对称心	任　意	二次轴
$\bar{4}$	垂　直	4

表 5-11　三维点群作截面时对称性的变化

三维点群中的对称元素	对称元素与截面的关系	截面中的对称性
n 次轴	垂　直	n 次轴
n 次轴	平　行	无
对称面	垂　直	对称面
对称面	平　行	无
对称心	任　意	无
$\bar{4}$	垂　直	2

在点群 $\bar{3}\,2/m$ 中，垂直于 $\bar{3}$ 轴的截面的二维点群为 $3m$，沿 $\bar{3}$ 方向的投影的点群为 $6mm$；对于点群 Td——$\bar{4}3m$，沿基矢 a 的投影的点群为 $4mm$，垂直于 a 的截面的点群为 $2mm$。

（一）晶体表面上腐蚀坑的形状

晶体表面上的腐蚀坑的形状是二维图形，它所具有的对称性

与三维晶体点群之间的关系由表 5-11 表示．腐蚀坑的对称性将是 10 种二维点群之一．图 5-17 给出具有三种不同点群的正交晶

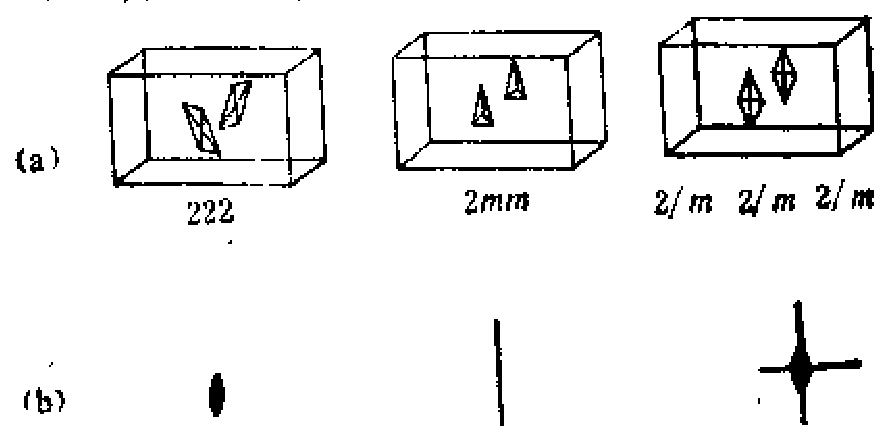


图 5-17 几种正交晶系晶体表面的腐蚀坑与其相应的点群

(a) 在平行于阵胞表面的平面上，腐蚀坑的形状；

(b) 腐蚀坑所对应的二维点群

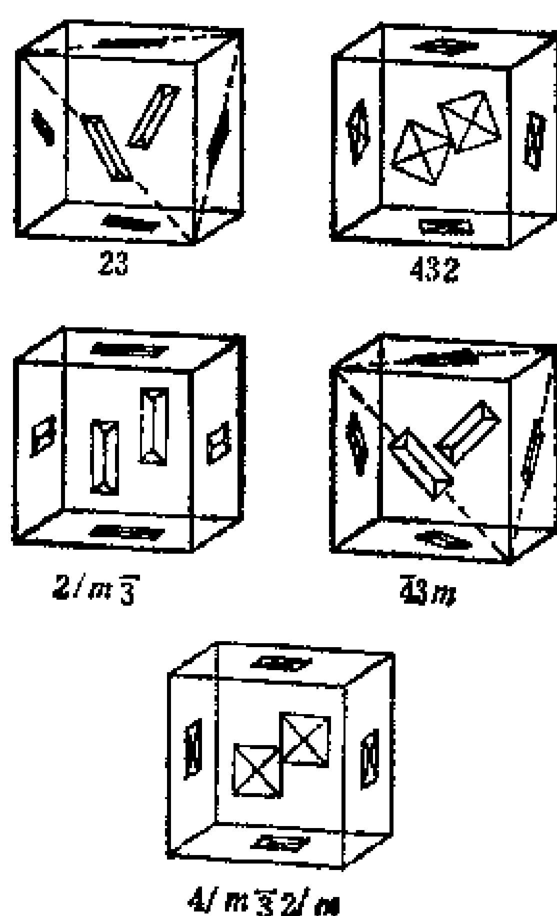


图 5-18 属立方晶系的几种晶体上典型的腐蚀坑形状，晶体的表面与立方阵胞的表面平行

素晶体的腐蚀坑形状与其对应的二维点群. 图中的各长方形面平行于正交阵胞的表面.

图 5-18 给出具有不同点群的立方晶系的晶体表面上的腐蚀坑形状,这些晶体的表面都平行于立方阵胞的表面. 图 5-19 为在奥氏体不锈钢断口上看到的腐蚀坑形状 (a) 与其对应的二维点群 (b).

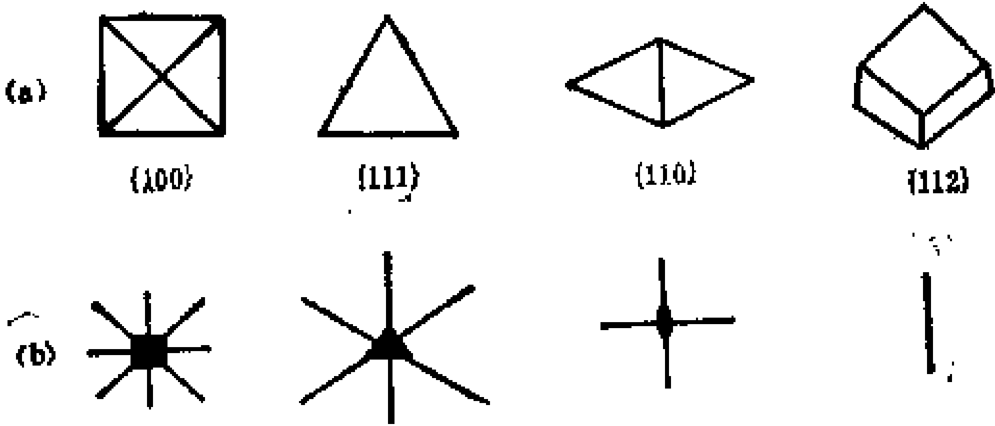


图 5-19 奥氏体不锈钢断口处的腐蚀坑
(a) 腐蚀坑形状; (b) 腐蚀坑对应的点群

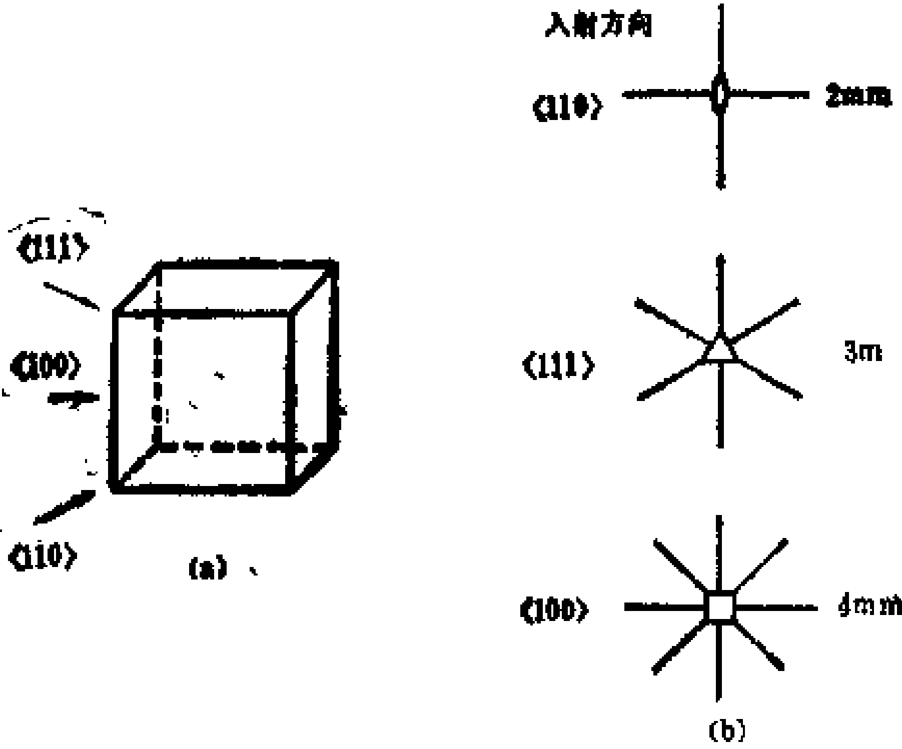


图 5-20 Si 单晶体的衍射图形,立方体的单晶表面平行于阵胞面
(a) 入射线的方向, 它们分别沿立方体的 〈111〉、〈100〉 和 〈110〉 方向;
(b) 相应于不同入射方向时衍射图形的对称性

（二）衍射图样的二维点群

在单晶体的衍射图样中呈现出的对称性，由其入射线方向上的点群的对称元素所决定.衍射图样的对称性分别由 10 种二维点群描述． 图 5-20 示意表示射线以不同方向入射到 Si 单晶体上时 (a) 和所得衍射图样的对称性 (b)． 图中所示立方体的表面都平行于 Si 阵胞的表面． Si 的点群为 $m\bar{3}m$． 因此，由衍射图样的对称性，可以大致判断其入射线的方向．

练　习　题

1. 请给出下列各图形的点群(图 5-21)．

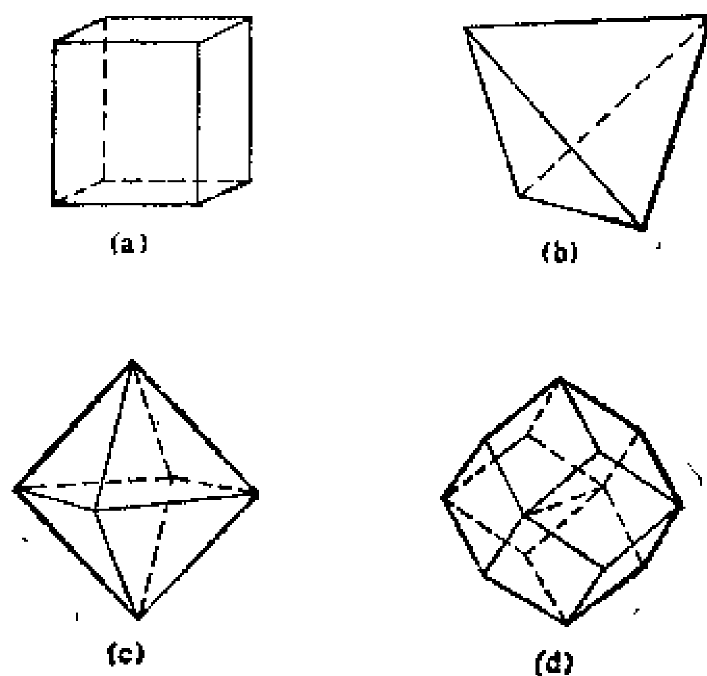


图 5-21　几种形体

(a) 立方体；(b) 正四面体；(c) 正八面体；(d) 正十二面体

2. 请给出图 5-22 所示晶体的点群及应属的晶系．

图中所示为晶体发展完善的外形．

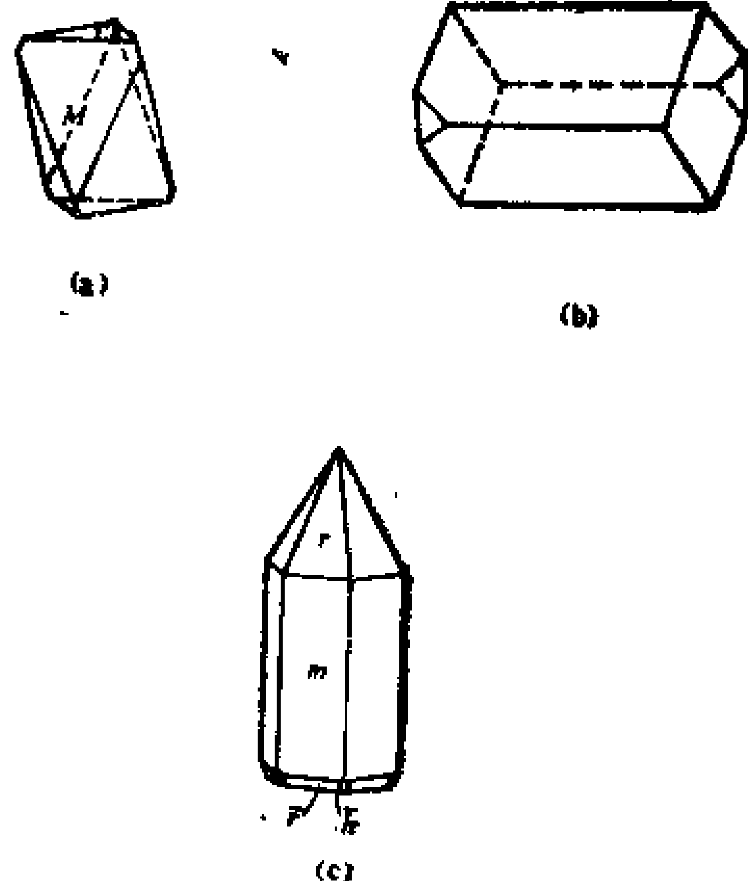


图 5-22　几种发展完善的晶体外形

(a) $CaCO_3$;　(b) $FeSO_4 \cdot 7H_2O$;　(c) BeO

3. 请从图 5-23 中的腐蚀坑图形判断晶粒表面指数。

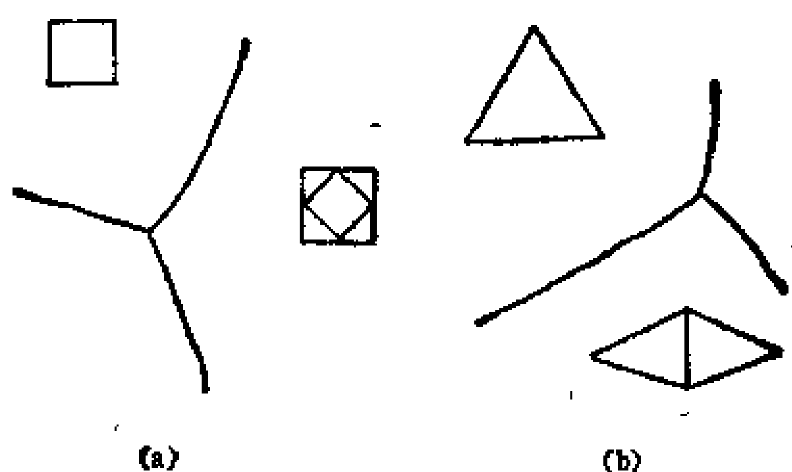


图 5-23　几种材料中的腐蚀坑，图中的曲线为晶界

(a) α-Fe;　(b) 不锈钢

复 习 题

1. 请说明什么是点群?

2. 请说明点群符号 $6/m\,mm$ 中各个字母的意思。

3. 请给出立方晶系中的$\{111\}$形。

4. 已知 α-Zr 属 $6/m\,mm$ 点群，请分析 $\{hkil\}$ 面的重复因数。

5. 请说明腐蚀坑的形状与点群的关系。

第六章 晶体的空间群

晶体的空间群是晶体的宏观对称元素与微观对称元素的总合。与晶体结构的周期性相对应，晶体的空间群中对称元素的分布也呈周期性，所以仅用一个阵胞中对称元素的分布就能表达整个空间群的面貌。

晶体的空间群资料不仅有助于晶体结构的测定，而且也能帮助材料工作者了解晶体中原子、空位、间隙等的分布规律。

晶体有 17 种平面群(二维空间群)、230 种空间群。本书只着重于介绍空间群的概念，以及能从晶体空间群资料中获得的信息。

一、17 种平面群

平面群是由二维点群与平面点阵组合而成。10 种点群与可能的平面点阵相结合构成13种平面群，由表 6-1 中的第三列所示，其

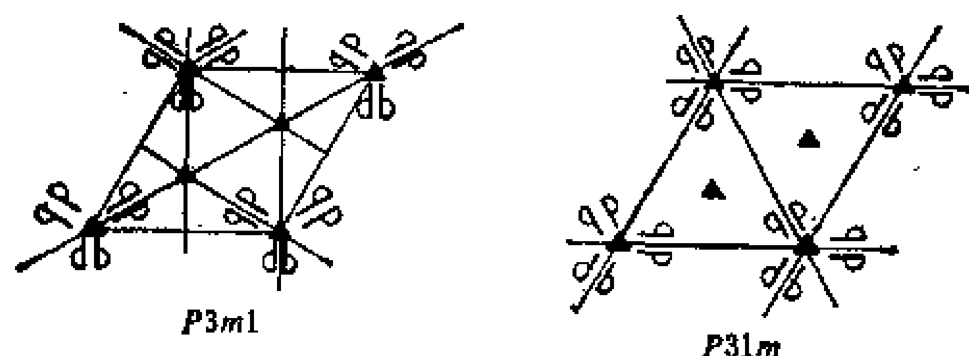


图 6-1 平面群 $P3m1$ 和 $P31m$，两者的差别在于点群 $3m$ 相对于点阵顺时针转 30°

表 6-1　二维点群与平面点阵结合构成平面群

平面点阵	二维点群	平面群	
		直接来自点群的平面群	带滑动面的平面群
斜　形	1	$P1$	
	2	$P2$	
矩形 (P: 简单, C: 有心)	m	Pm, cm	Pg
	$2mm$	$P2mm$, $c2mm$	$P2mg$, $P2gg$
正方形	4	$P4$	
	$4mm$	$P4mm$	$P4gm$
六方形 (P: 三角形)	3	$P3$	
	$3m$	$P3m1$, $P31m$	
	6	$P6$	
	$6mm$	$P6mm$	

中平面群 $P3m1$ 和 $P31m$ 在于点群 $3m$ 与三角形点阵组合时的两种可能性，它们的差别在于点群 $3m$ 相对于点阵顺时针转动了 30°，如图 6-1 所示。同时，由于点群与点阵的平移对称性相组合，

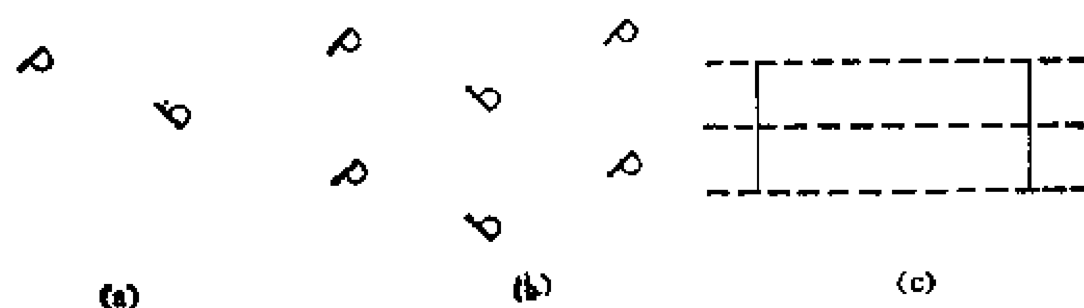


图 6-2　Pg 平面群的形成

(a) 结构单元；(b) 结构单元 (a) 与矩形点群结合的结果；(c) 平面群 Pg

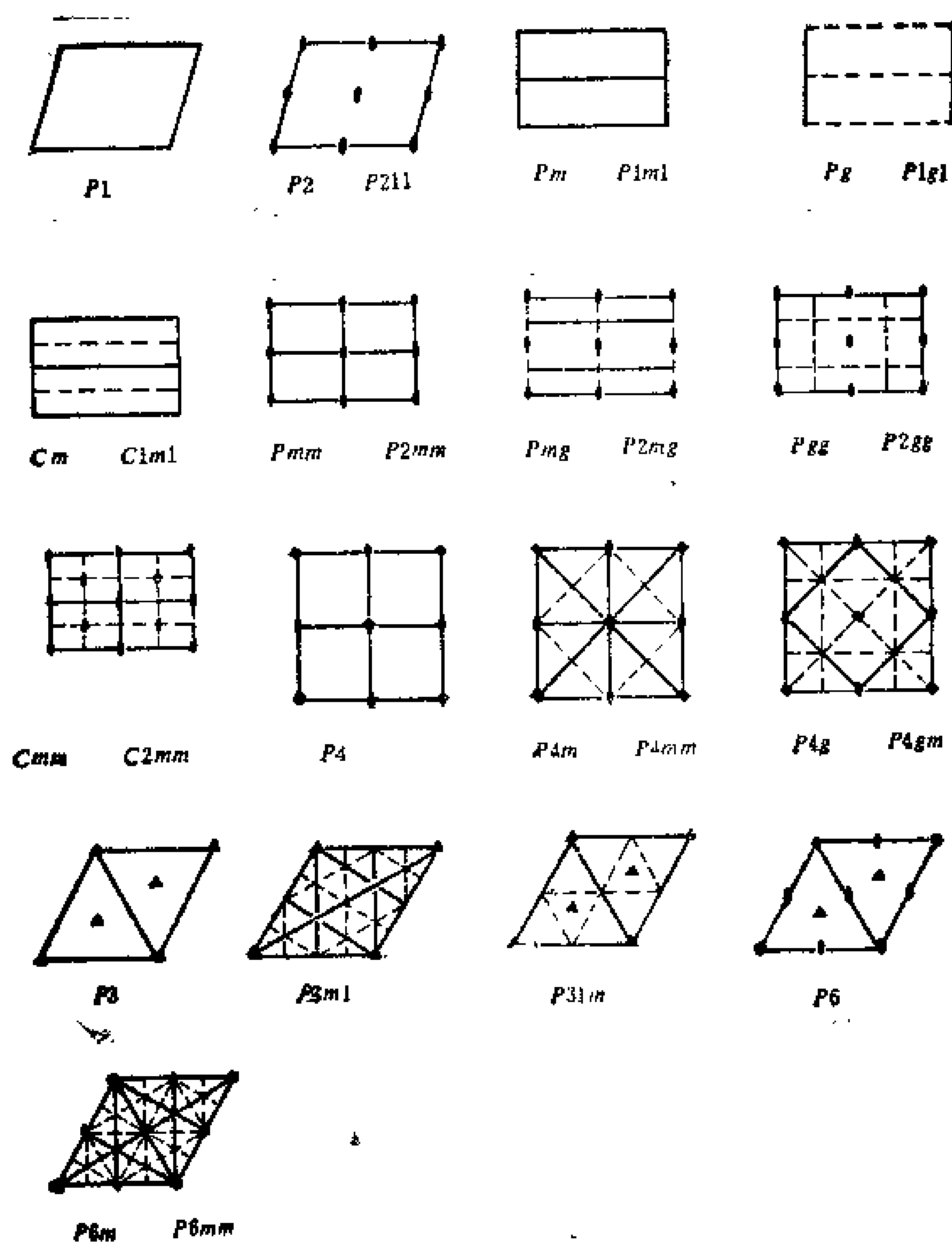


图 6-3 17 种平面群的图形及它们的全写(右下方)与缩写(左下方)符号

可能形成滑动面。例如图 6-2(a) 所示的结构单元具有点群 1，当其与矩形点阵结合时形成图 6-2(b)，它具有滑动面 g。如图 6-2(c) 中的粗虚线所示。图 6-2(c) 所示的为平面群 Pg。带滑动面的平面群共有 4 种，列于表 6-1 的第四列中。于是，共有 17 种

平面群。

图 6-3 给出 17 种平面群在一个阵胞中的对称元素。图形下方的字母与数字是该平面群的符号，左下方的为缩字，右下方的为全字。P 代表简单平面点阵；C 代表有心平面点阵。图中的粗实线代表对称面 m，间断线代表滑动面 g。

二、空 间 群

32 种三维点群与 14 种空间点阵相结合，再考虑这些组合可能产生的滑动面与螺旋轴，总共形成 230 空间群。与平面群相似，空间群的符号也是由点阵类型符号与点群符号结合而成，只是点群中的对称面可以用不同类型的滑动面 a、b、c、n 和 d 代替，对称轴可以用各种相应的螺旋轴代替。例如单斜晶系有简单阵胞 P 与底心阵胞 C，它们与属单斜晶系的点群 $2/m$ 相结合，可以构成下面六种空间群。

$$P\,2/m,\ P\,2_1/m,\ C\,2/m,\ P\,2/c\ \ P\,2_1/c,\ C\,2/c$$

上面所写的为空间群的国际符号，前面的字母代表点阵类型，后面的符号为点群 $2/m$ 及其派生的符号。而空间群的熊夫利斯符号则与其对应的点群符号一致，只是右上角加上数字标号，以区别属于同一点群的一系列空间群。例如点群 $2/m$ 的熊夫利斯符号是 C_{2h}，则上述 6 种空间群的熊夫利斯符号分别为 C_{2h}^1、C_{2h}^2、C_{2h}^3、C_{2h}^4、C_{2h}^5 和 C_{2h}^6。

材料的粉末衍射卡（PDF）中都给出该材料所属的空间群，由此能够得知材料的点群及所属晶系。表 6-2 给出几种材料的空间群，点群及晶系，以说明三者之间的关系。

图 6-4 为单斜点阵与点群 2 构成的 4 种空间群。图示的为沿垂直轴即 c 轴的投影。P 为简单阵胞，A 为侧心阵胞。2 与 2_1 分别为 2 次轴与 2 次螺旋轴。圆圈"○"为一般等效点系的位置，它

表 6-2　几种材料的空间群，点群和晶系

材　　料	空间群	点　　群	晶　　系
α-Zr	$C\frac{6}{m}mc$	$6/mmm$	六　　方
ZrO_2	$P\frac{2_1}{c}$	$\frac{2}{m}$	单　　斜
α-Al_2O_3	$R\bar{3}c$	$3m$	菱　　形
γ-Al_2O_3	$Fd3m$	$m3m$	立　　方
Si	$Fd3m$	$m3m$	立　　方
SiO_2 (α-石英)	$C312$	32	六　　方

们旁边的"+"与"$\frac{1}{2}$+"分别表示沿 c 轴正方向的某处及比正方向某处高 $\frac{1}{2}c$ 的位置. 所谓等效点系，是由空间群中所有对称元素所联系的点. 而一般等效点系是指由空间群所联系的不在对称

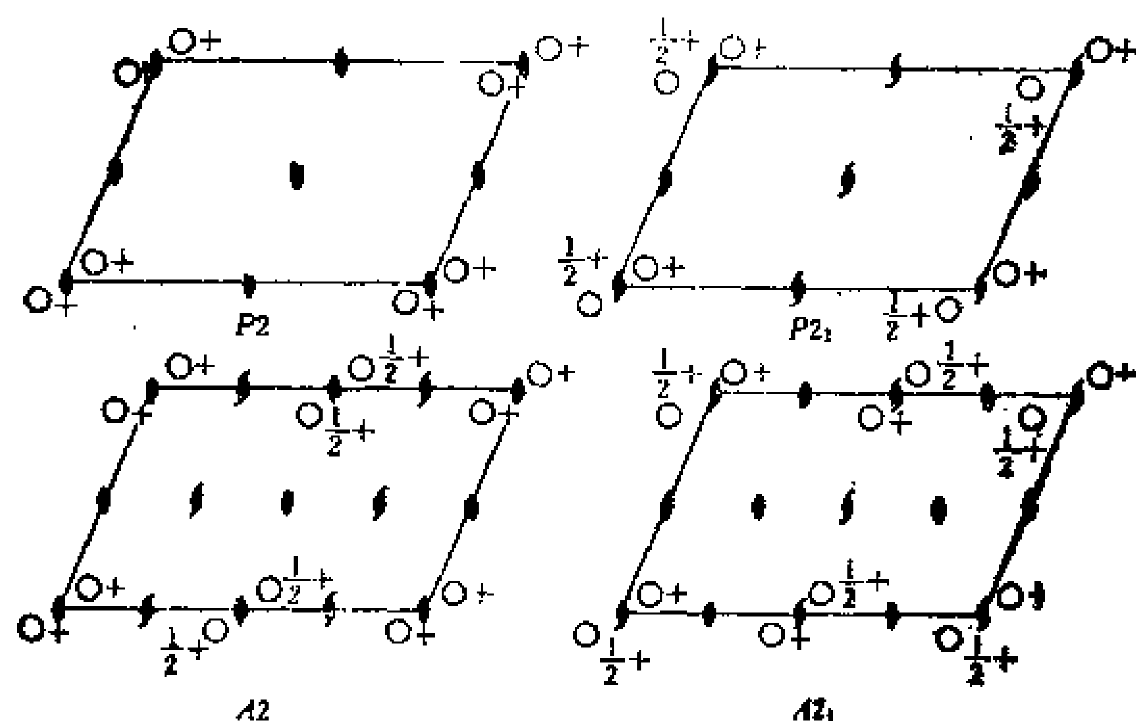
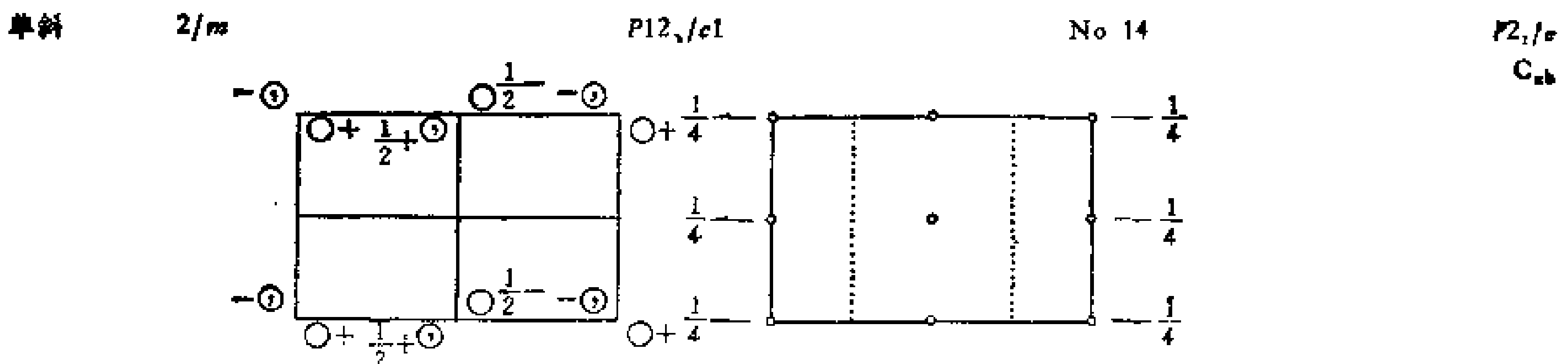


图 6-4　单斜点阵与点群 2 构成的 4 种空间群图形，图面垂直于 c 轴. P 为简单点阵，A 为侧心点阵. "○"为一般等效点系的位置. "○"侧的符号与数字表明等效点在 c 轴的高度.

单斜　　2/m　　$P12_1/c1$　　No 14　　$P2_1/c$　C_{2h}^5



等效点位置数 魏柯夫记号 点的对称性　　原点在$\bar{1}$;唯一轴 b　　出现衍射的条件，一般的:

等效点位置数	魏柯夫记号	点的对称性	等效点位置坐标
4	e	1	$x, y, z;\ \bar{x}, \bar{y}, \bar{z};\ \bar{x}, \frac{1}{2}+y, \frac{1}{2}-z;\ x, \frac{1}{2}-y, \frac{1}{2}+z.$
2	d	$\bar{1}$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2};\ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$
2	c	$\bar{1}$	$0, 0, \frac{1}{2};\ 0, \frac{1}{2}, 0$
2	b	$\bar{1}$	$\frac{1}{2}, 0, 0;\ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
2	a	$\bar{1}$	$0, 0, 0;\ 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

hkl: 无条件

$h0l$: $l=2n$

$0k0$: $k=2n$

特殊的：上述条件加上

hkl: $k+l=2n$

对称性的特殊投影

(001) pgm; $a'=a$, $b'=b$　　(100) pgg; $b'=b$, $c'=c$　　(010) $p2$; $c'=c/2$, $a'=a$

图 6-5　$P2_1/c$ 空间群资料

元素上的点系。等效点系中点的数目是指某一阵胞中点的数目。

《International Tables for X-Ray Crystallography》第一卷中列有230个空间群的图表，这是了解晶体结构的重要资料。下面以 ZrO_2 的空间群为例，简要介绍这些图表的用法。图6-5取自上述之书。图中第一行从右到左分别是空间群国际符号的缩写和熊夫利斯符号，空间群序号，空间群符号全写，点群符号和晶系；往下的两个图形分别是对称元素系(右图)和一般等效点系(左图)在一个阵胞内的 c 俯视图，图中的空圆圈"○"表示右手形状分子的位置，中间带逗号的圆圈"⊙"表示左手形状的分子位置，分子位置旁边的"+"或"−"号分别表示它们高于或低于投影面；图下面的表从左到右分别给出一般等效点系和特殊等效点系中点的数目，魏柯夫记号，点的对称性，以及能出现衍射线的指数条件；最下面一行为空间群 $P2_1/c$ 分别在(001)、(100)和(010)面上投影时形成的平面群。唯一轴为 $\boldsymbol{b}$，表示此时取 $\boldsymbol{b}$ 轴垂直于基矢 $\boldsymbol{a}$ 与 $\boldsymbol{c}$。第四章中已经介绍过单斜阵胞基矢的两种取法，取 $\boldsymbol{c}$ 轴为垂直棱时，即 $\boldsymbol{c}\perp(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})$ 时，称为第一组；取 $\boldsymbol{b}$ 为垂直棱时，即 $\boldsymbol{b}\perp(\boldsymbol{c}\times\boldsymbol{a})$ 时，称为第二组。所以第14号空间群采用了第二组，这是晶体学工作者的习惯。不管垂直棱如何取法，有心面总在一对矩形面上，第一组时在 $\boldsymbol{a}$、$\boldsymbol{c}$ 构成的面上，第二组时在 $\boldsymbol{b}$、$\boldsymbol{c}$ 构成的面上，而不在平行四边形上，请见图4-9(b)、(c)和(d)。

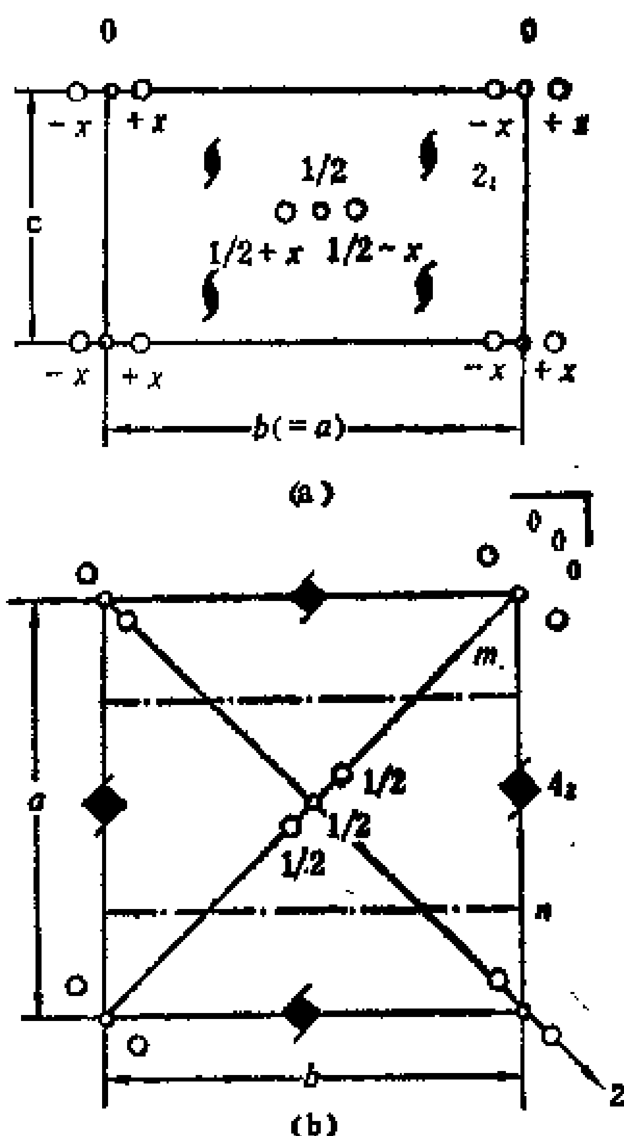
三、实 例 分 析

现以$(Ti_2N)\,6T$ 为例，分析其结构、点阵、空间群，以及如何从空间群资料深入理解其结构规律。$6T$ 表示每个晶胞中有6个原子，T 表示属正方点阵。

图6-6为$(Ti_2N)\,6T$ 结构在(001)面上的投影。图中的大圆圈代表Ti原子，小圆圈代表N原子。细线圆圈代表 $z=0$ 层上

的原子，称为 A 层；粗线圆圈代表 $z=1/2$ 层上的原子，称为 B 层。$(Ti_2N)\,6T$ 的结构是这两层原子以 $ABAB\cdots\cdots$ 方式排列而成。图中的虚线为 $(Ti_2N)\,6T$ 晶胞的范围，实线相应于 β-Ti 晶胞。因此，$(Ti_2N)\,6T$ 晶胞内有 4 个 Ti 原子和 2 个N原子，共 6 个原子，它的点阵参数为 $a=b=4.9452\,Å$，$c=3.0342\,Å$，a、b 和 c 相互垂直。这是正方点阵的特点。由于 A 层中的N原子与 B 层中的N原子的环境不同，所以它属简单阵胞。

图 6-7(a) 和 (b) 分别是



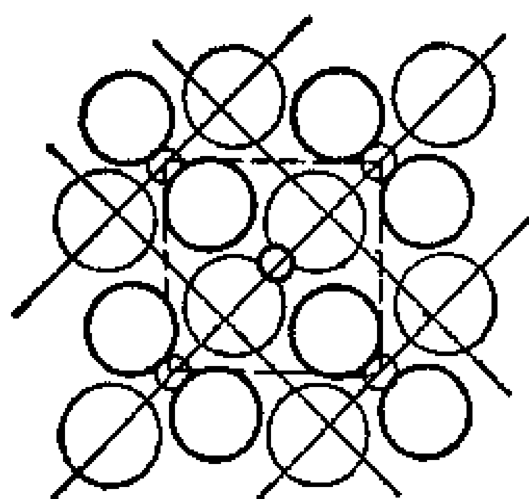


图 6-6 $(Ti_2N)\,6T$ 的晶体结构在 (001) 面上的投影，大圆圈和小圆圈分别表示 Ti 原子和N原子的位置。细线所示的是 $z=0$ 层上的原子，粗线所示的是 $z=\frac{1}{2}$ 层上的原子、虚线所示为 $(Ti_2N)6T$ 的晶胞范围，实线相应于 β-Ti 的晶胞

图 6-7 $(Ti_2N)\,6T$ 在 (100) (a) 和 (001) (b) 面上的投影，"○"与"ο"分别代表 Ti 和 N 原子，图(a)、(b)中原子边的数字分别标明原子在 a 和 c 轴上的坐标．同时绘出几种对称元素的位置

(Ti_2N) $T6$ 在(100)和(001)面上的投影图。图中"○"和"o"分别代表 Ti 和N原子。图 6-7(a) 中的数字分别表明代表 Ti 和N原子的 a 坐标;图 6-7(b) 中的数字分别标明 Ti 和N原子的 c 坐标。从图中看出，在平行 c 方向有 4_2 螺旋轴和与轴垂直的对称面，在 a 方向有 2_1 螺旋轴和与其垂直的对角滑动面 n；在[110]方向有二次轴和与其垂直的对称面，所以 (Ti_2N)$6T$ 的空间群符号是 $P\,4_2/m\,2_1/n\,2/m$，缩写符号为 $P4_2/mnm$。从其空间群资料可以得知 Ti 和N原子分别处在魏柯夫记号的 f 和 a 组，都是特殊等效点系位置，Ti 位于两个对称面上，N位于 3 个对称面上。结构中的 Ti 原子属于同一等效点系，也就是说，已知一个 Ti 原子的坐标，就可以利用对称元素系获得结构中所有原子的位置。对于N原子也是如此。

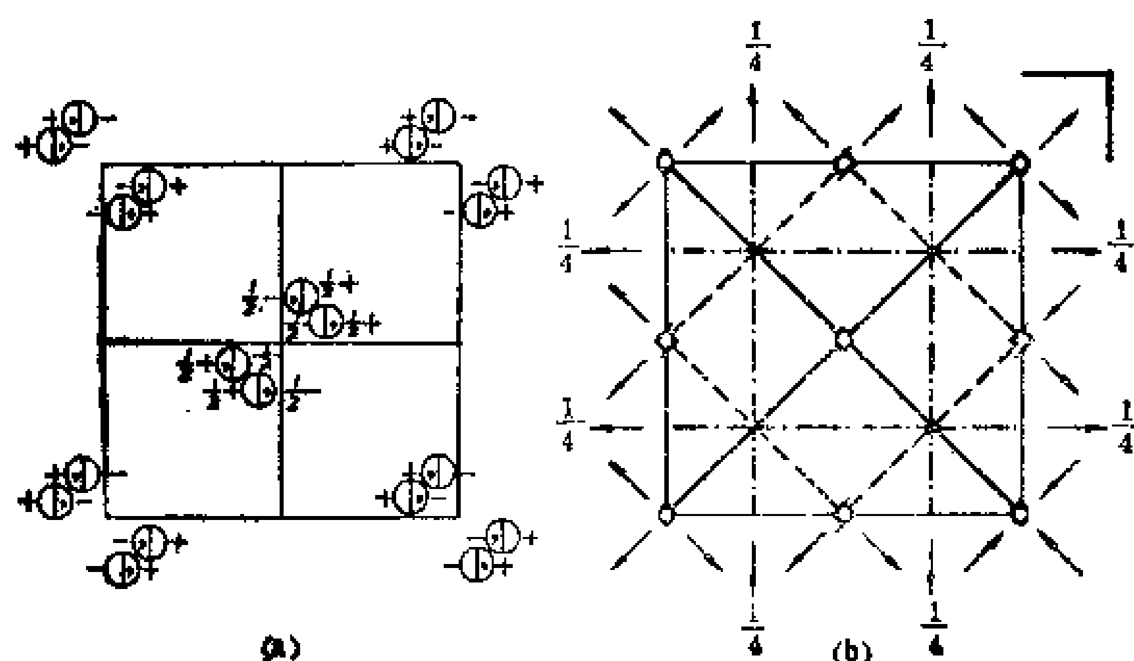


图 6-8 $P4_2/mnm$ 空间群
(a) 等效点系；(b) 对称元素

图 6-8 为 (Ti_2N) $6T$ 的空间群等效点系 (a) 和对称元素系 (b) 在一个阵胞内的反映。图中各种符号的意义与图 6-5 相同。

练　习　题

1. 已知 $(Ti_3N)\ 12U$ 的空间群是 $I\ 4_1/d\ 2/m\ 2/d$，请给出它的点群，点阵和阵胞类型。

2. 图 6-9 是 $I\ 4_1/d\ md$ 空间群的对称元素系图，请说明图中各对称元素的意义。

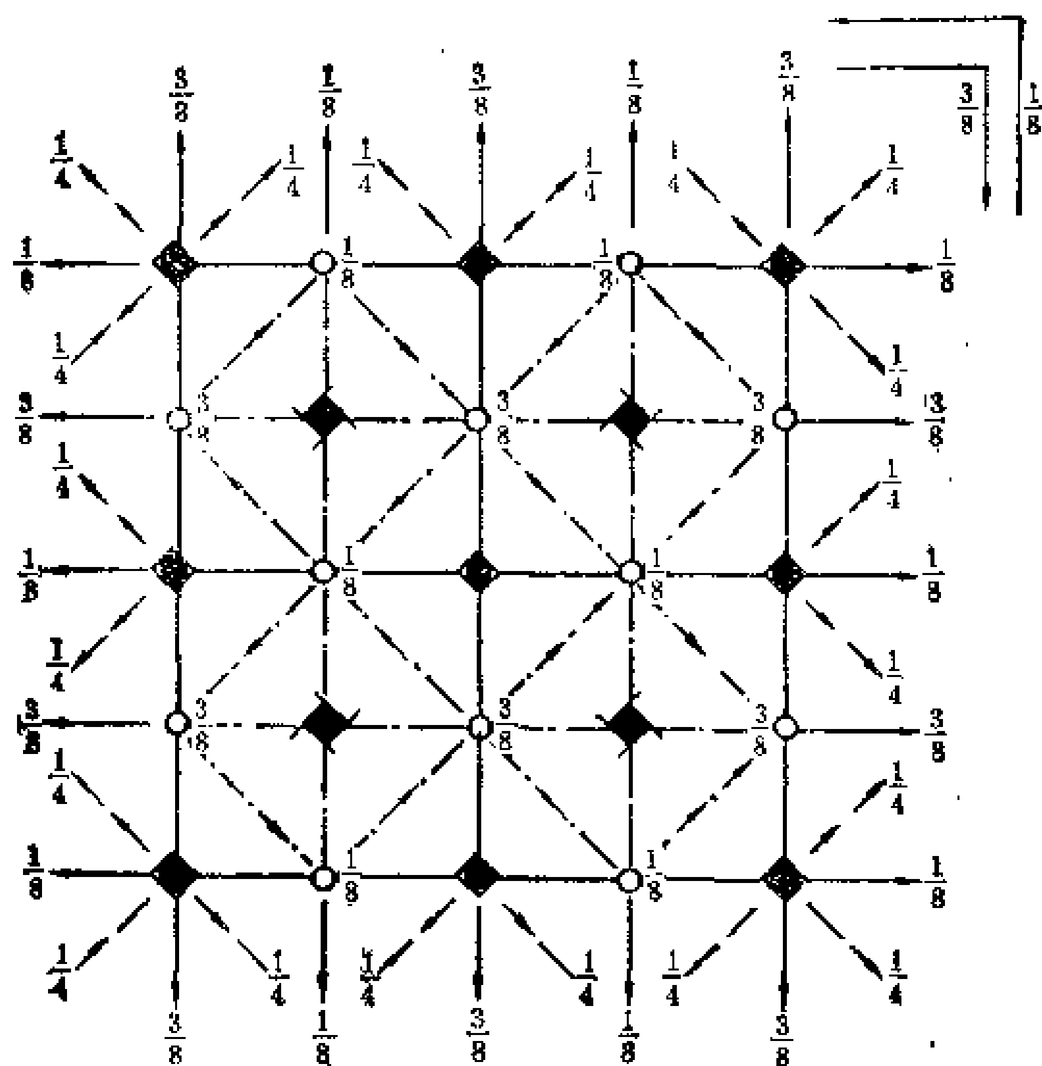


图 6-9　空间群 $I\ 4_1/a\ md$ 的对称元素系图

3. 图 6-9 中取 $\bar{4}m2$ 为坐标原点，一点在 $\bar{4}m2$ 处，求其等效点系中各点的坐标。

4. 金刚石结构如图 6-10 所示，请判断它属何种空间群。

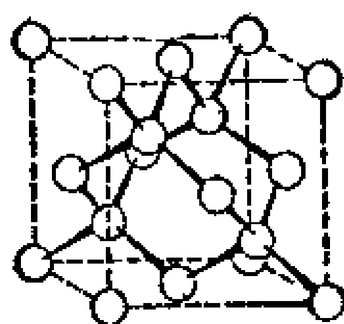


图 6-10 金刚石晶体的晶胞

复 习 题

1. 请说明什么是平面群，它有多少种。
2. 请说明什么是空间群。
3. 请看懂图 6-5。
4. 请说明什么是等效点系。

第七章　典型的晶体结构

晶体结构是指晶体中原子、离子、分子等的具体分布，这种分布可以用晶胞来描述．在讨论晶体结构时，认为原子和离子都是有确定半径的硬球，分子是由大小不等的硬球构成的固定形体．

一、晶体结构的几何规律

虽然晶体结构理论——相互作用的原子之间的结合理论——是基于热力学、固态物理和量子力学的一般原理，然而，这种相互作用的结果，在几何上又是极为简单的．在晶体的几何模型中主要考虑晶体的结构单元，它们之间的距离和配位关系，附加之原子之间的化学键性质．几何途径是揭示晶体结构概念的起始点，它能以简单和图示的形式表达和描述晶体结构的若干规律．

（一）结构单元

晶体的结构单元可以是原子、原子集团或分子．

例如在金属元素的晶体中，结构单元往往是金属原子本身，像Al、Cu···；非金属元素晶体的结构单元则常是由该元素原子构成的结构固定的群体，如金刚石中的碳四面体、B-12 中的硼二十面体(图 7-1) 等．

此外，对于结构复杂的晶体，结构单元中可能包含某些特定的原子集团，它们可以是分子，无机阴离子集团，化合物、金属间化合

物等．例如无机晶体结构中常存在 CO_3^{2-}、SO_4^{2-}、NO_2^-、H_2O、$[PtCl_4]^{2-}$ 等．它们都有自己特定的结构，呈现出一定的对称性．

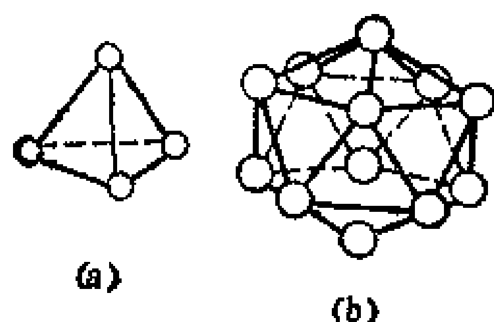


图 7-1 晶体结构中的多面体
(a) 金刚石结构中的碳原子四面体；(b) B-12 中的硼原子二十面体

图 7-2 给出某些原子集团的实例．这些集团可以孤立地存在于晶体结构之中，也可以形成链、层或三维网络．

由结构单元构成晶体时，要着重考察它们的自身形状和对称性．例如包含 CO_3^- 的 $CaCO_3$ 晶体(图 7-3)，具有菱形晶胞，它们都具有三次轴．如果结构单元的对称性为 G_0，点阵中点的对称性为 K，空间群的对称性为 ϕ，则构成晶体时 $G_0 \geq K$，即结构单元的对称性可以高于点阵的对称性．例如具有高对称性的苯分子，$6/mm$ 能够堆积成正交晶胞，分子中心的位置对称性为 $\bar{1}$．又如呈现四面体对称性的 SO_4，可以在

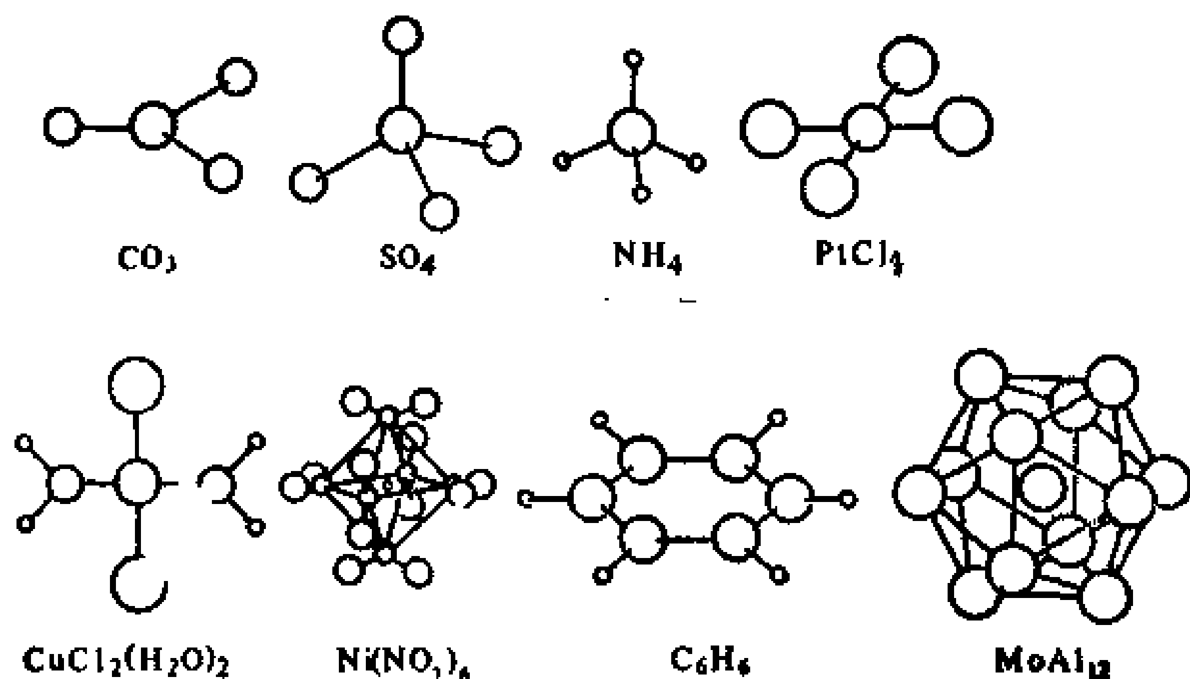


图 7-2 晶体结构中存在的原子集团实例，它们可以是分子、阴离子集团、化合物和金属间化合物等

不同的晶体结构中占据不同的对称位置，可以与四面体的对称性相当(在方石英中),也可以低于四面体的对称性，如在许多硅酸盐中处于2、m或1的位置. 同时，空间对称性ϕ也调制着结构单元之间的安排. 例如，空间对称性将图 7-4(a) 所示的具有对称面的排列改变成图 7-4(b) 所示的具有滑动面的安排，这样可以使结构单元之间排列得更为紧凑.

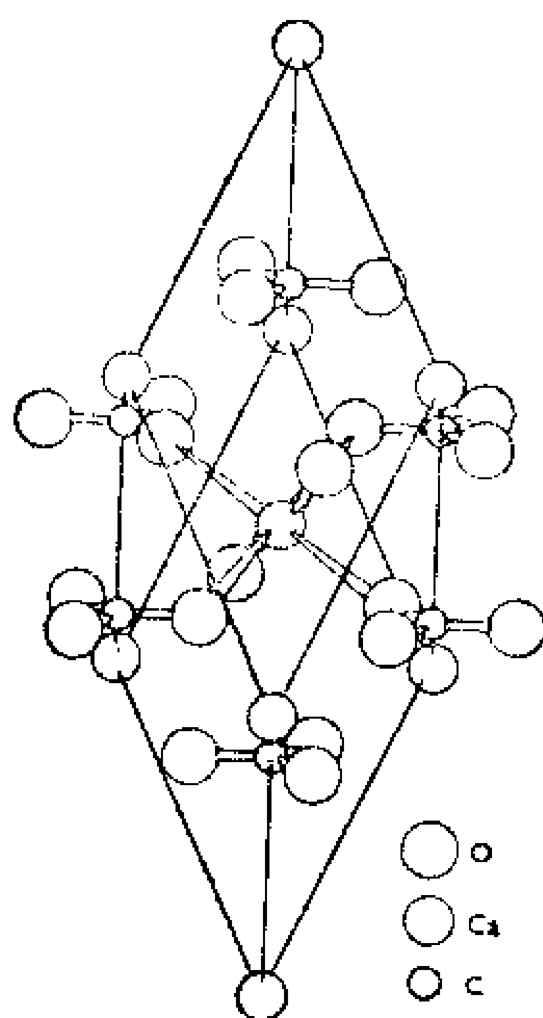


图 7-3 $CaCO_3$ 晶体结构中的 CO_3^{2-} 原子集团与菱形晶胞的对称性一致

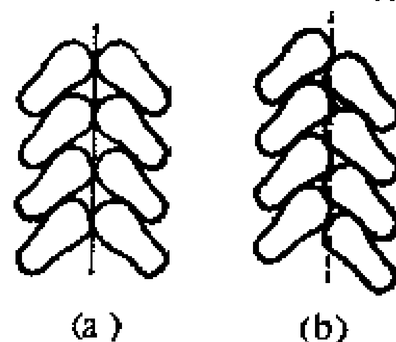


图 7-4 空间对称性对结构单元安排的调制作用

(a) 为结构单元安排成具有对称面的图形；(b) 将 (a) 调制后使图形具有滑动面,结构单元在(b)中比在(a)中排列的更紧凑

对于结构单元来说,孤立时的对称性 G_0^3 与在晶体中时的对称性 G^3 可以相同,也可以不同，即 $G_0^3 \supseteq G^3$. 于是应有 $G_0^3 \geq G^3 \geq$ $\boldsymbol{K}$.

(二) 密排特征

决定晶体结构特征的是能量最小原理，即使晶体结构处于最低的能态. 对于金属键、离子键、这种无特定方向性的相互作用

力，能量最低原理与原子的密排几何是一致的．因此，这类晶体是以原子密排方式构成的．对于金属，只是金属原子的密排；对于离子晶体，则一般是阴离子密排，而阳离子有序地处于阴离子构成的间隙之中．

下面讨论球的密排几何和对称性，以及某些相关的问题．

硬球的二维密排方式只有一种，如图 7-5 所示．这种排列方式在原子中心具有六次轴，三个球形成的空洞中心有三次轴，两两球相切之处有二次轴，自然还有若干对称面．如果只示出这时的原子中心(图 7-6 中的黑色圆点)则可以清楚地看出，它们形成的正三角形与倒三角形是两种不同的孔洞．于是三维密排球相邻两层之间会有两种排列方式．如果图 7-6 中的黑、灰和白圆圈分别表示 A、B、C 层内的原子中心位置，则三维排列的方式可以为：$ABAB\cdots$；$ABCABC\cdots$；$ABACABAC\cdots$；$ABC\ ACB\ ABC\ ACB\cdots$；$ABAC\ ACBCBA\ BAC\ ACBCB\cdots\cdots$等．图 7-7 中给出的都是这种密排方式的一个周期．

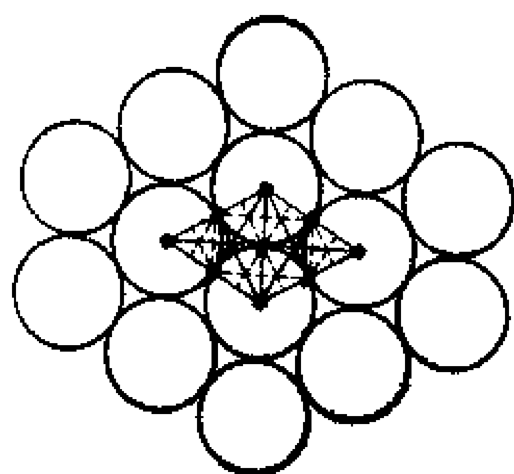


图 7-5　二维密排形式与它的对称性

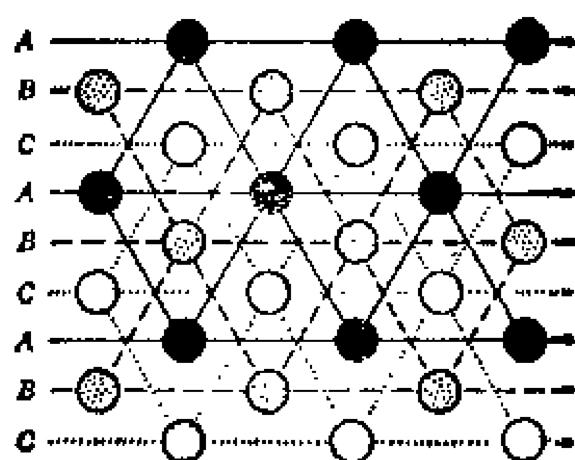


图 7-6　三维密排时各层中原子的可能位置，将图中的黑、灰、白原子位置分别记为 A、B、C

在三维密排方式中，以 $ABAB\cdots\cdots$和 $ABCABC\cdots\cdots$最为常见，它们构成以图 7-8 所示的密排六方和面心立方结构，空间群

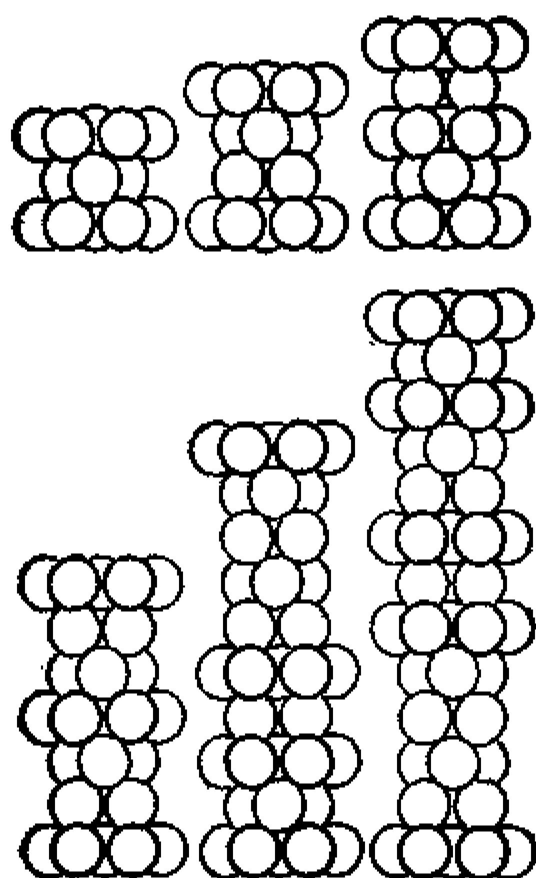


图 7-7　若干三维密排方式中的一个周期

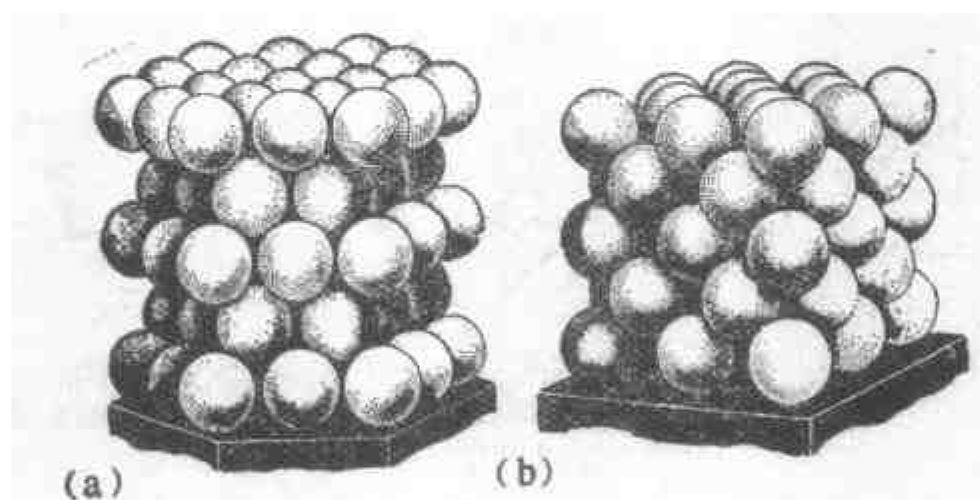


图 7-8　常见的两种密排结构

(a) 密排六方；(b) 面心立方结构

分别为 $P6_3/mmc$ 和 $Fm\bar{3}m$. Na、Al、Cu、Fe、Au 等为面心立方结构，Mg、Be、Cd、Zn 等为密排六方结构.理想密排六方结构中的轴比 $c/a=1.633$，实际的晶体总有些偏离，如Be的为 1.57，Cd

的为 1.89。

原子半径相近的异类原子也可以构成密排形式，如有序化的 Cu_3Au，是 Cu 与 Au 原子分层的 *ABC ABC*···密排；图 7-9 所示的是半导体合金 $AgBiTe_2$ 的结构，它的密排周期为：

排列次序 *ABCABC ABC ABC A*······

原子　　AgTe BiTe AgTe Be Te Ag TeBiTeAg······

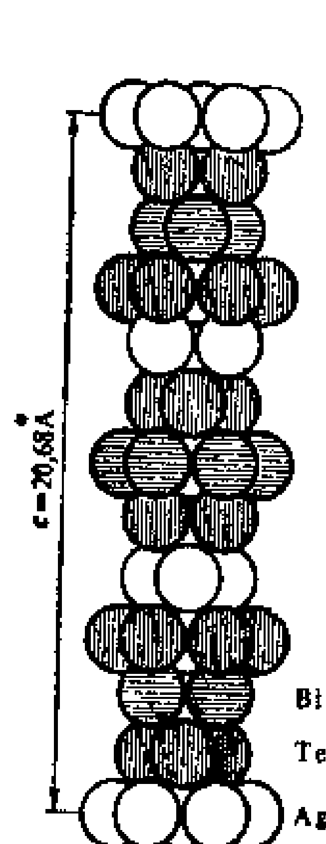


图 7-9　半导体合金 $AgBiTe_2$ 的结构

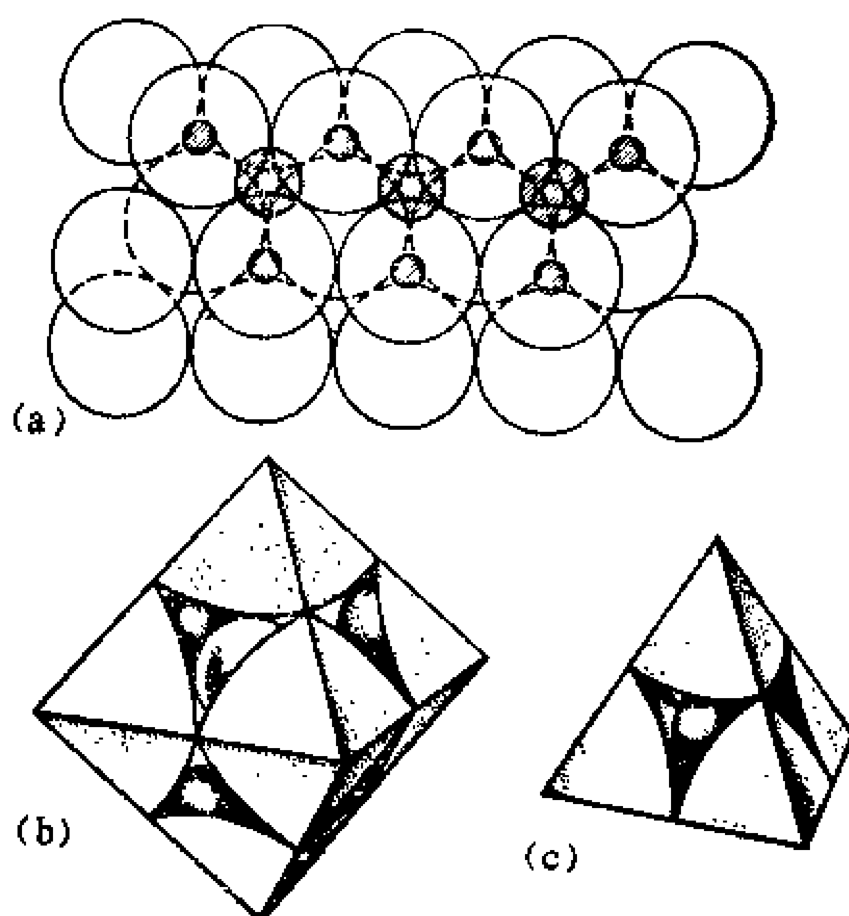


图 7-10　两层密排球中的间隙
(a) 四面体(小影线圆)与八面体(大影线圆)间隙位置；(b) 八面体间隙与其中可存放的最大球；(c) 四面体间隙与其中可存放的最大球

密排结构中有两种间隙或空洞，即八面体和四面体间隙。四面体间隙由相邻的两层原子构成，由图 7-10(a)中的小影线圆和(c)所示；八面体间隙虽然也是由相邻的两层原子构成，如图 7-10(a)中的大影线圆圈和(b)所示，但不十分容易认别其构成原子的位

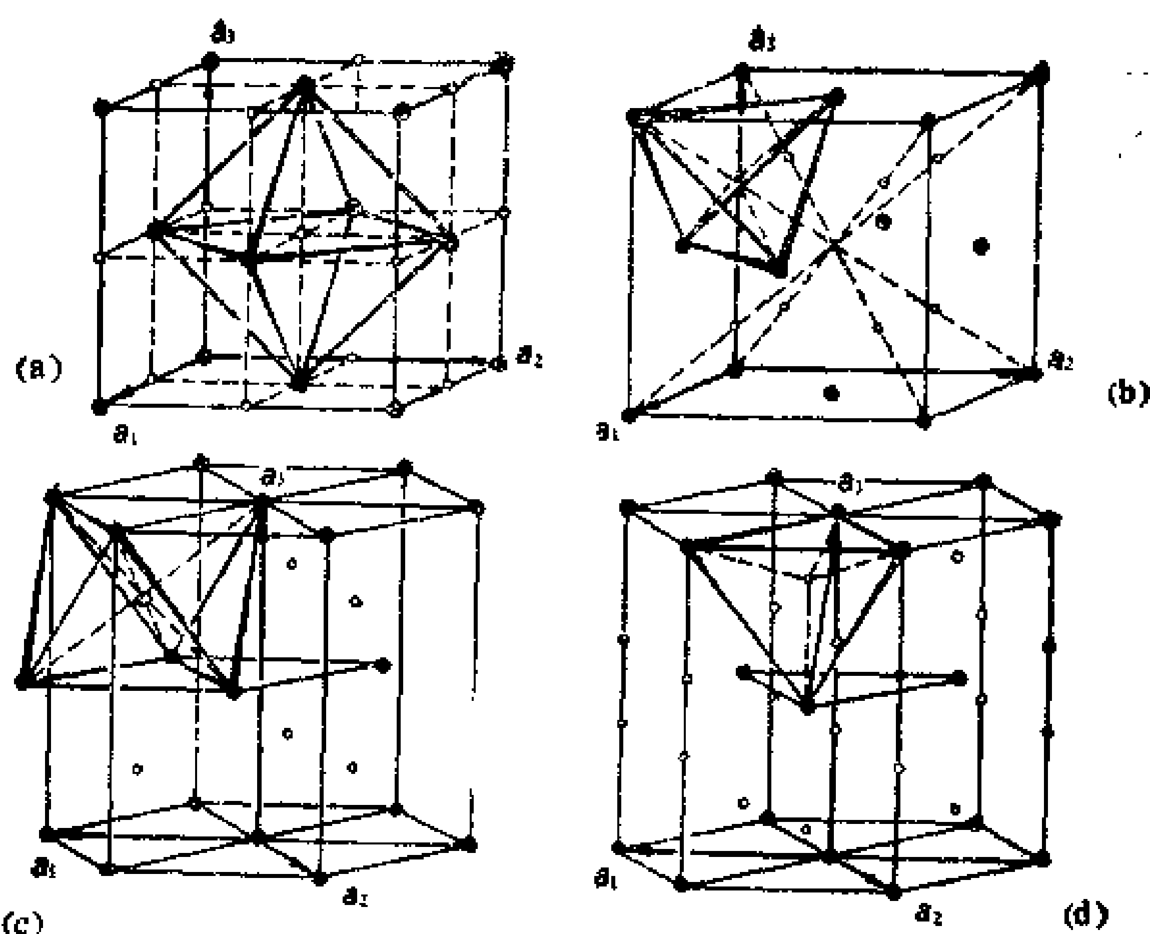


图 7-11　常见的两种密排方式中八面体和四面体间隙位置，“○”代表间隙位置，“●”代表原子中心

(a) 面心立方结构中的八面体间隙；(b) 面心立方结构中的四面体间隙；(c) 密排六方结构中的八面体间隙；(d) 密排六方结构中的四面体间隙

置．然而，与图 7-11 中的 (c) 相比较，就明确了它们的构成方式．图 7-11 为常见的两种密排方式中的八面体和四面体间隙位置．它们的坐标由表 7-1 给出．如果密排原子的半径为 R，则在八面体和四面体间隙中可以存在的最大小球半径分别为 $0.415R$ 和 $0.225R$．

然而，在绝大多数的离子晶体中，“密排”的阴离子球相互之间不再接触，因为阳离子把它们撑开了．

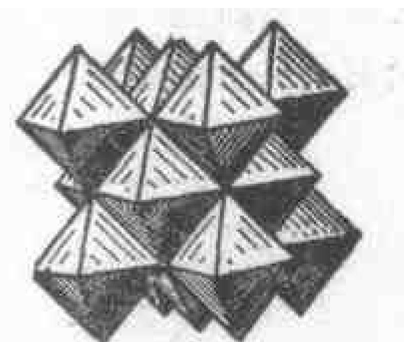
因此，这时密排原则实际上已经消失了，只是密排时原子位置的规律对于阴离子的安排极为有利．另一方面，最大填充原则和对称性总是近似地保留着．

表 7-1 常见的两种密排结构中的间隙位置

结构	间隙	坐标	等价数目 每个结构单胞	每个原子
面心立方	八面体	$0\ \frac{1}{2}\ 0$　$\frac{1}{2}\ 0\ 0$　$0\ 0\ \frac{1}{2}$ 棱中点	4	1
		$1\ \frac{1}{2}\ 0$　$\frac{1}{2}\ 1\ 0$　$1\ 0\ \frac{1}{2}$		
		$0\ \frac{1}{2}\ 1$　$\frac{1}{2}\ 0\ 1$　$0\ 1\ \frac{1}{2}$		
		$1\ \frac{1}{2}\ 1$　$\frac{1}{2}\ 1\ 1$　$1\ 1\ \frac{1}{2}$		
		$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$ 体心		
	四面体	$\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{4}$　$\frac{1}{4}\ \frac{3}{4}\ \frac{1}{4}$　$\frac{3}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{4}$　$\frac{3}{4}\ \frac{3}{4}\ \frac{1}{4}$	8	2
		$\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{3}{4}$　$\frac{1}{4}\ \frac{3}{4}\ \frac{3}{4}$　$\frac{3}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{3}{4}$　$\frac{3}{4}\ \frac{3}{4}\ \frac{3}{4}$		
密排六方	八面体	$\frac{2}{3}\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{4}$　$\frac{\bar{1}}{3}\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{4}$　$\frac{\bar{1}}{3}\ \frac{\bar{2}}{3}\ \frac{1}{4}$	6	1
		$\frac{2}{3}\ \frac{1}{3}\ \frac{3}{4}$　$\frac{\bar{1}}{3}\ \frac{1}{3}\ \frac{3}{4}$　$\frac{\bar{1}}{3}\ \frac{\bar{2}}{3}\ \frac{3}{4}$		
		$\frac{1}{3}\ \frac{2}{3}\ \frac{1}{3}$　$\frac{\bar{2}}{3}\ \frac{\bar{1}}{3}\ \frac{1}{3}$　$\frac{1}{3}\ \frac{\bar{1}}{3}\ \frac{1}{3}$		
		$\frac{1}{3}\ \frac{2}{3}\ \frac{7}{8}$　$\frac{2}{3}\ \frac{\bar{1}}{3}\ \frac{7}{8}$　$\frac{1}{3}\ \frac{\bar{1}}{3}\ \frac{7}{8}$		
	四面体	$0\ 0\ \frac{3}{8}$　$0\ 0\ \frac{5}{8}$	12	2
		$1 0 \frac{3}{8}$　$1 1 \frac{3}{8}$　$0 1 \frac{3}{8}$　$\bar{1} 0 \frac{3}{8}$　$\bar{1}\bar{1} \frac{3}{8}$　$0 \bar{1} \frac{3}{8}$	六棱柱垂直棱上	
		$1 0 \frac{5}{8}$　$1 1 \frac{5}{8}$　$0 1 \frac{5}{8}$　$\bar{1} 0 \frac{5}{8}$　$\bar{1}\bar{1} \frac{5}{8}$　$0 \bar{1} \frac{5}{8}$		

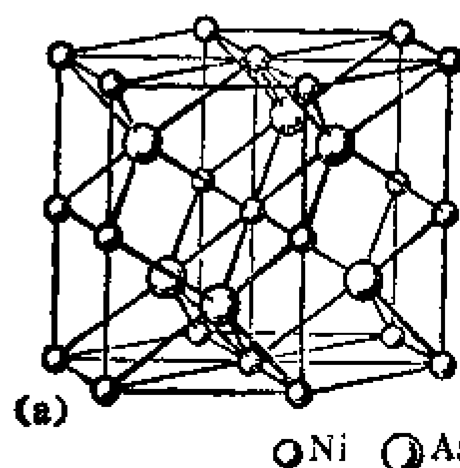
从阴离子各种密排方式与阳离子占据间隙的不同几率入手，可以描述多种结构。这时，可以用以各种方式相连接的四面体或八面体来描述结构。例如，占据面心立方中的所有八面体间隙构成 NaCl 型结构，图 7-12 为它的多面体描述方式；而占据密排六方结构中所有八面体间隙形成 NiAs 型结构，图 7-13(a) 和 (b) 分别为该晶体结构的原子中心位置和八面体堆积的描述方法。

如果密排六方排列中有半数八面体间隙被占据，则有 CdI_2 型结构；占据 2/3 的间隙相应于 Al_2O_3 型结构．如果填满面心立方结构中的所有四面体间隙，将导致 Li_2O 型结构．


图 7-12 NaCl 结构的多面体描述

（三）配位

分析晶体结构时，很重要的是研究原子或分子的环境，它的近邻



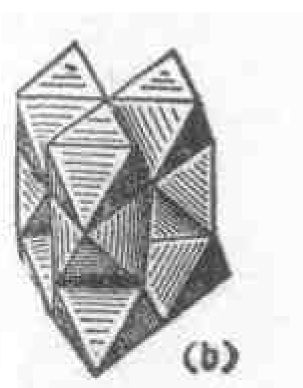


图 7-13　NiAs 结构

(a) 原子位置描述；(b) 多面体描述

数，近邻特征及与近邻之间的距离．能够以简单的配位数和配位多面体来描述这一概念．

配位数是指原子或分子的最近邻数目，或者说是在第一配位球面上的原子或分子数目．例如面心立方结构的 Al，其配位数为 12；体心立方结构的 α-Fe，其配位数为 8．然而对于许多低对称结构的化合物，到最近邻的距离可以稍微不同，但仍使用配位数的概念，这时要保证最近邻组与次近邻组之间有间隙．对于那些第一、二配位球没有明显差别的情况，要同时标明两组配位数，如 8＋6 等．

晶体结构中的配位数与化学键性质和原子位置的对称特征有关。对于金属键和离子键晶体，通常配位数较大，为 12，6+8，8+6 等；对于共价键晶体则较小，一般为 3、4 或 6。

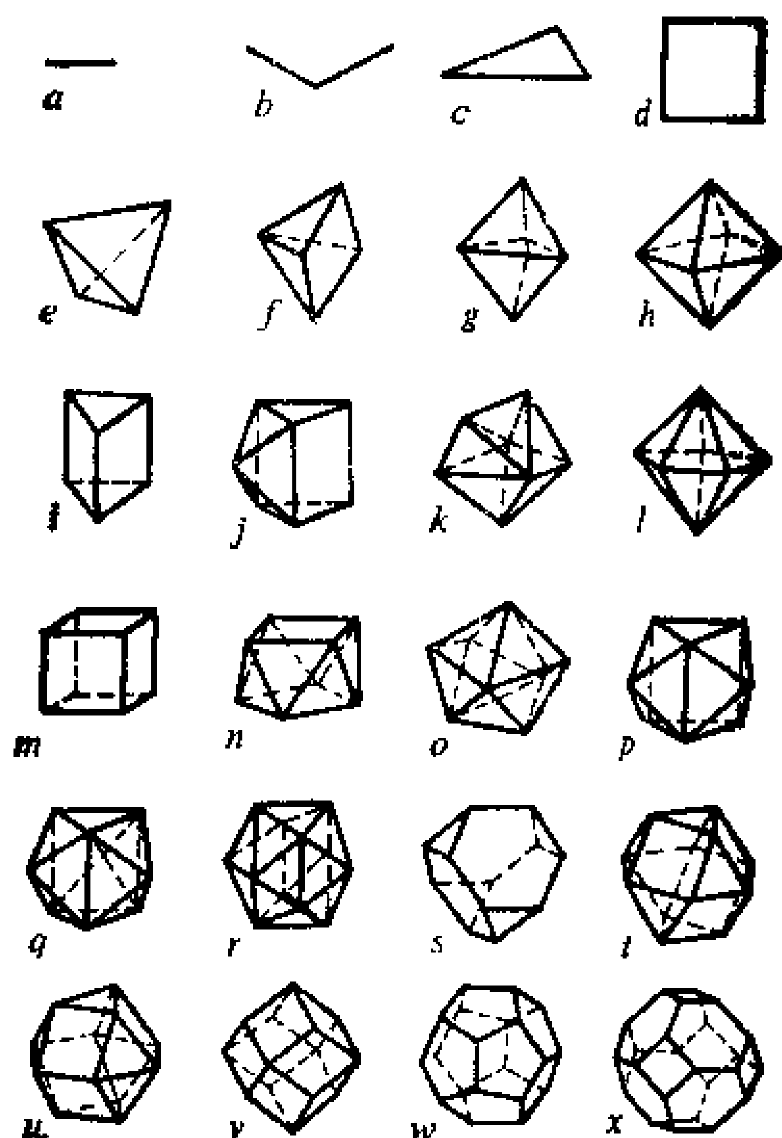


图 7-14　各种配位多面体，记配位数为 c. n.

(a) 亚铃形，c. n = 1；(b) 角形，c. n = 2；(c) 三角形，c. n = 3；(d) 正方形，c. n = 4；(e) 四面体，c. n = 4；(f) 四棱锥，c. n = 5；(g) 三棱双锥，c. n = 5；(h) 八面体，c. n = 6；(i) 三棱柱 c. n = 6；(j) 单帽三棱柱，c. n = 7；(k) 七角多面体，c. n = 7；(l) 五棱双锥，c. n = 7；(m) 立方体，c. n = 8；(n) 反位正方柱，c. n = 8；(o) 三角形十二面体，c. n = 8；(p) 双帽柱 c. n = 8；(q) 三帽三棱柱，c. n = 9；(r) 二十面体，c. n = 12；(s) 平截四面体，c. n = 12；(t) 立方八面体 c. n = 12；(u) 六角立方八面体 c. n = 12；(v) 菱形十二面体，c. n = 14；(w) 五边形十二面体，c. n = 20；(x) 平截八面体 c. n = 24。

对于由分子组成的晶体，配位的概念是指对于给定的分子中心考察其周围分子中心的排列状态.

如果用直线联系第一配位球上的近邻原子中心，我们将获得凸形多面体，称之为配位多面体. 配位多面体的顶角数等于配位数，中心到顶角的距离是配位原子之间的间距. 棱长则为近邻原子之间的距离. 图 7-14 为各种类型的配位多面体. 从图 7-14 可以看出，对于给定的配位数，配位多面体的形态可能不同，它们都具有特定的点群. 当从晶体结构中抽出这些配位多面体时，可以看出它们可以是孤立的，也可以与其它多面体共角、棱或面.

对于离子晶体，配位多面体的顶角为阴离子，中心为阳离子，因此它们的间隙多面体也是配位多面体.

于是，配位多面体不仅是阐明和描述晶体结构的一种方式，同时它也包含着一定的物理和化学意义.

（四）结构中的某些参数

计算晶体结构中的某些参数有助于了解晶体的解理、腐蚀等物理、化学性质.

晶体的堆积密度 η 为在单位体积中原子体积所占的份数. 例如晶胞体积为 v，晶胞内含有的原子数目为 n 时，则

$$\eta = \frac{n v_a}{v}$$

其中 v_a 为原子体积. 对于密排结构，η 为 0.74；对于体心立方结构的 η 为 0.68. Si、Ge 等半导体材料具有金刚石型结构，其 η 为 0.34.

图 7-15 为沿 Si、Ge 等金刚石结构晶胞（图 6-10）⟨111⟩方向观察时形成的六方晶胞. 图中表示出了它们的共价结合特点. 表 7-2 给出它们的立方晶胞中三个主要晶面和方向的面间距、面的原子密度，作用于原子面之间，相应于每个原子的共价键数目，

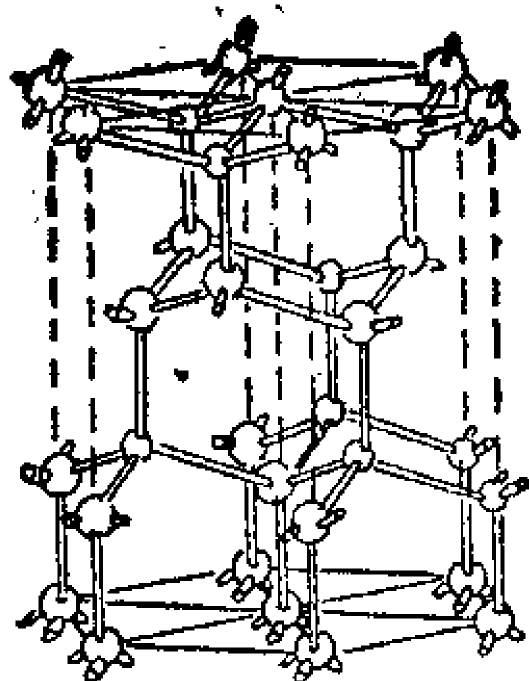


图 7-15 沿金刚石、Si、Ge 的立方晶胞(见图 6-10)〈111〉方向观察时形成的六方晶胞

晶面之间的共价键面密度和原子的线密度．由表中数据可以看出{111}面之间的间距最大，面上原子密度最大，但面间相对每个原子的共价键数少，因此晶体最易沿{111}面解理．

二、元素的晶体结构

(一) 周期表与晶体结构

元素晶体结构的基本特征取决于它们在周期表中的位置．图7-16为以元素在周期表中的位置绘制的晶体结构示意图． 能把它们分为两大类，即金属与非金属结构．

典型的金属结构决定于其键合的金属特性，它是无方向性的，因此，这些结构都基于原子密排．沿周期表往下，往右看去，在原子键合之中共价键的影响份数增加，金属结构变得较为复杂，它们的键合呈现出某些方向性的特征． 在周期表的右方，从 B、Si、Ge、Sn 开始，具有典型的共价结构．然后是由共价键形成原子群，再由

图 7-16　与周期表中位置相应的元素晶体结构示意图，其中各种图形符号的意义为：1.面心立方；2.密排六方；3.体心立方；4.分子结构；5.具有配位数 8-N 的结构；6.其他结构．如果结构存在某些变化时，则从外到内的符号相应于从高温到低温的转变，然后再是存在于高压下的变态．图中只列出共认的经过充分研究的变态

表 7-2　Si、Ge 在主要晶面与晶向上的结构参数

晶向或晶面	面间距	原子面密度	作用于每个原子的键数(晶面间)	原子线密度
100	$\frac{a}{4}=0.25a$	$\frac{2}{a^2}$	2	$\frac{1}{a}$
110	$\frac{\sqrt{5}}{4}a=0.35a$	$\frac{2\sqrt{2}}{a^2}=\frac{2.83}{a^2}$	1	$\frac{\sqrt{2}}{a}=\frac{1.41}{a}$
111*	$\frac{\sqrt{3}}{4}a=0.43a$	$\frac{4.62}{a^2}$	1	$\frac{2\sqrt{3}}{3a}=\frac{1.17}{a}$

* 这里除原子面密度是指双层（111）面内外，其他数据都指的是间距大的一组（111）面.

范德瓦尔键相连．最终是惰性元素，它们之间没有强键，只由范德瓦尔键相维系．因此，这里有典型金属结构，共价-金属结构．典型共价结构、分子杂键结构和惰性元素的结构．

（二）多晶型

许多元素的晶体结构虽按温度、压力的变化而改变，因此称它们具有多晶型．图 7-17 给出 Fe、Ce 的 P-T 相图．α-Fe 为体心立方

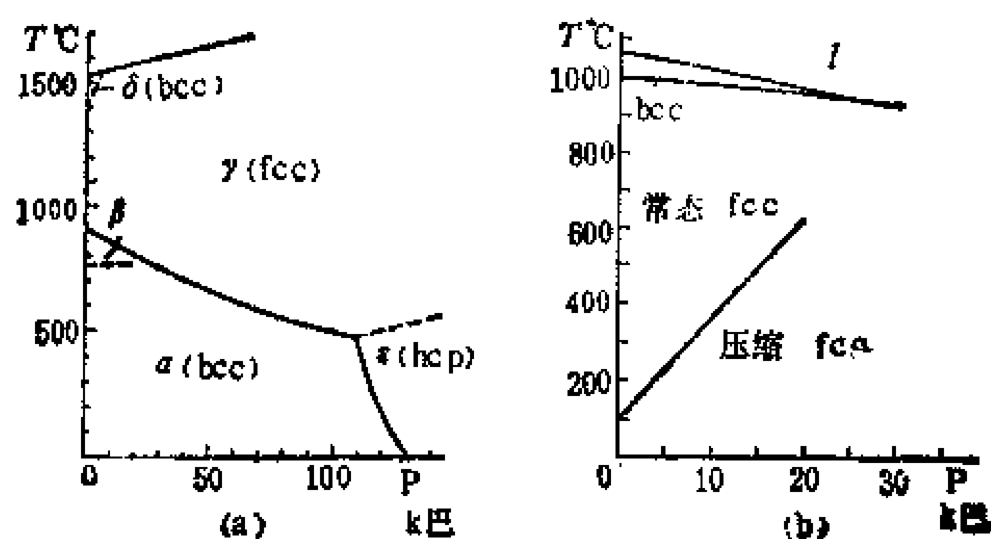


图 7-17　几种材料的 P-T 相图

(a)Fe;　　(b)Ce

结构，有铁磁性，到 770℃ 变成 β-Fe，仍为体心立方结构，但铁磁性消失；到 920℃ 时转变成面心立方的 γ-Fe，到 1400℃ 又转变成体心立方的 δ-Fe．Ce 在高压下虽然保持着面心立方结构，但点阵参数由 5.14 Å 下降到 4.84 Å．图 7-16 中给出了公认存在的多晶型．

一般说来，当压力增加时，倾向于转化成较密的堆积结构，高压能导致金属化．温度增加一般导致键的方向性减弱，对称性增加

例如，在极高的压力下 (1×10^{11} 帕)，固态 Xe 成为金属，并且呈现出超导性．

（三）元素的晶体结构

H_2 分子中心在 3K 超低温下呈面心立方排列，温度稍高时成密排六方结构．

IA 和 IIA 族及其他许多金属元素都为面心立方，体心立方和密排六方三种结构之一．

随着共价键影响的增加，金属结构变得较为复杂，但它们大都由密排结构变化而来．例如 Cd 和 Zn，它们的轴比 c/a 分别为 1.86和1.89这说明层内原子与层间原子的键合已经不同，实际上它们已偏离了密排结构．同时存在金属共价键结构，例如β-W(图7-18)，Mn 和锕系的 Pa、U、Np 等．

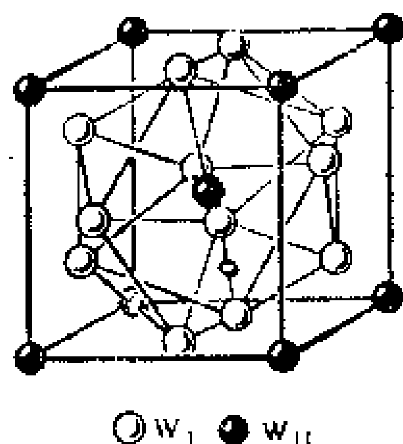


图 7-18　β-W 结构

通常金属与非金属的界线画在 IIIB 和 IVB 族之间，在原子序数低的 B 处向左移些，在原子序数高的 Sn、Pb、Bi 处向右移些．

在共价键结构中存在着简单的规律，即配位数 $K=8-N$，N为元素在周期表中所处的族数。例

如对于 B, $K=5$. 由共价键形成的原子群体之间常以范德瓦尔键或金属键维系成晶体结构.

硼具有很多种晶型. 由于它的配位数为 5, 促使它形成具有五次轴的二十面体对称性. 在二十面体中 B 原子之间的间距在 1.72—1.92 Å 之间变动. 已知的 B 的晶型有 B-12、B-50、B-78、B-84、B-90、B-100、B-105、B-108、B-134、B-192、B-288、B-700 和 B-1708, 它们具有极不相同的空间对称性. B-12 的结构单元为孤立的二十面体, 具有菱形晶胞, 每个晶胞内含有 12 个 B 原子. 因此称为 B-12. 它的六方晶胞点阵参数为 $a=4.91$ Å, $c=12.57$ Å. 结构在(0001)面上的投影由图 7-19 所示. 其他 B 的晶型的结构单元常由几个二十面体交织而成, 有的则是更为复杂的硼原子群体.

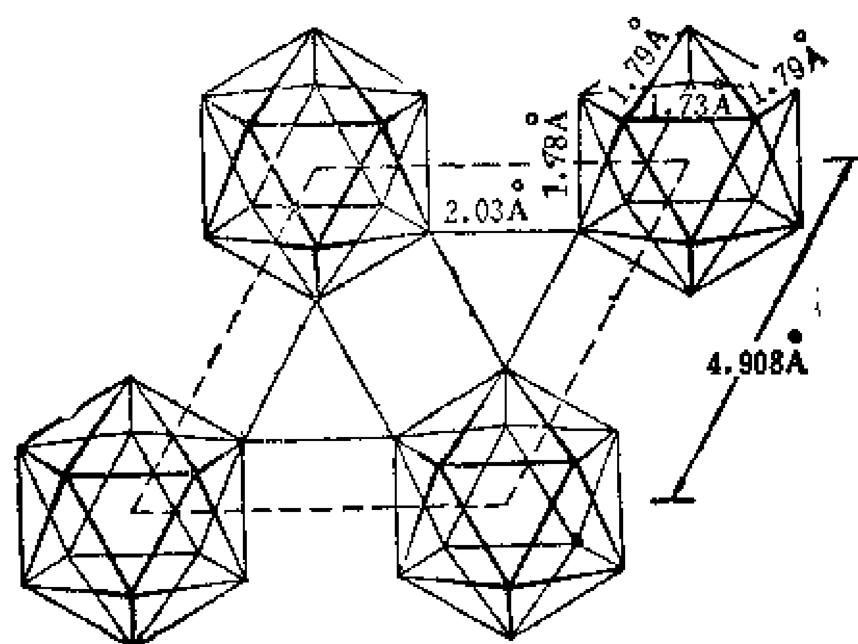


图 7-19 菱形结构 B 在六方(0001)面上的投影, 六方晶胞的 $a=4.91$ Å, $c=12.57$ Å

IVB 族元素 C、Si、Ge 和 α-Sn (灰锡)具有早已熟悉的四面体金刚石结构. β-Sn (白锡)具有经过畸变的金刚石结构, 即由图 7-20 所示的偏平的四面体构成. C的两种晶型——金刚石与石

墨——的结构我们早已熟知。这里只须再说明的是金刚石可有六方变态，石墨可以有菱形变态。碳的金刚石结构是亚稳态，它是在 7×10^9 帕压力，2000℃高温下生成的。

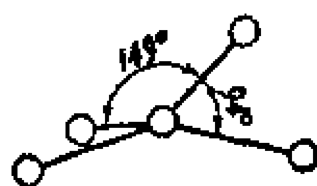


图 7-20　偏平的四面体，β-Sn 中的结构单元

VB 族中的 P、As、Sb 和 Bi 配位数为 3，都是层状结构。P 中的原子构成四面体。α-As、Sb 和 Bi 的结构相同，原子构成三棱锥键，组成菱形晶胞，如图 7-21(a) 所示。这一结构也可以看成是由两套近于立方的面心晶胞穿叉而成，其中一套面心晶胞的原子稍微偏离另一套的菱形棱的中点。

VIB 族元素 O、S、Se、Te 的配位数为 2。S 的一种晶型、Se 和 Te 为由拐角单元形成链状结构。它们的晶胞由图 7-21(b) 所示。可以把它看成由密排结构畸变而来。硫的其他晶型的结构单元是由 6 或 8 个原子构成闭合的折曲链环。

O_2、N_2 在它们的分子中形成双键，它们可以构成多种晶型的

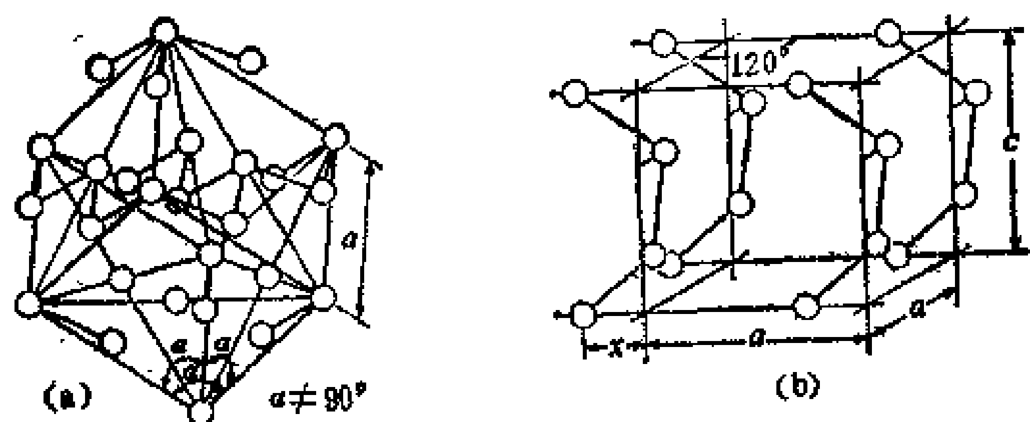


图 7-21　VB 和 VIB 族元素的典型结构

(a) α-As、Sb、Bi 的结构，它们有由皱褶层状原子构成的菱形晶胞。该晶胞也可以视为由两套近立方的面心晶胞穿叉而成，一套中的原子近于在另一套的棱的中点处；(b) Se 和 Te 的结构，它们有由曲链构成的六方晶胞

分子结构。F、Cl、Br、I形成双原子分子，也堆积成分子结构。图7-22为固态碘的结构，属面心正交点阵。

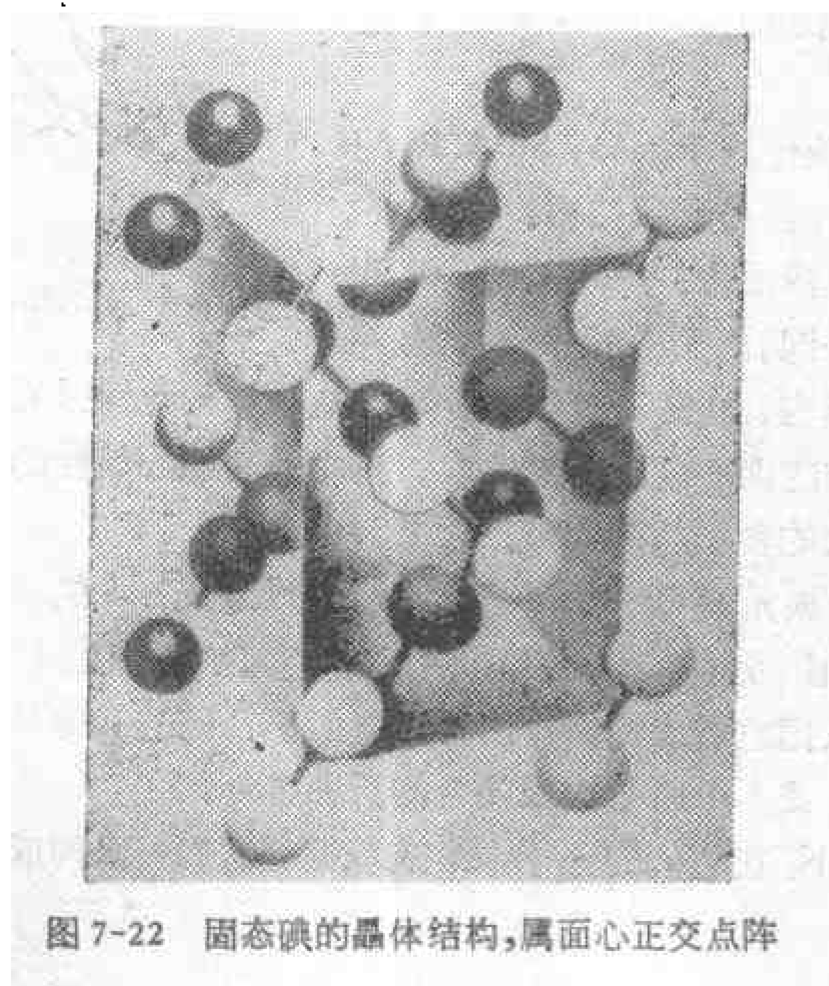


图 7-22 固态碘的晶体结构，属面心正交点阵

三、固溶体与中间相的结构

(一) 固溶体

当两种金属的结构相同，原子半径又相近时，则一种金属可以在另一种金属中无限固溶，Cu-Au 则是一个典型的例子。50%的 Au 与 50% 的 Cu 原子形成的固溶体，Cu、Au 原子占据面心立方结构中各个原子位置的几率相等。这时的晶体结构可以由图7-23(a)所示，即表示成各个原子位置都有一半的 Cu 原子和一半的 Au 原子。结构仍具有面心立方点阵。但当合金有序化后，

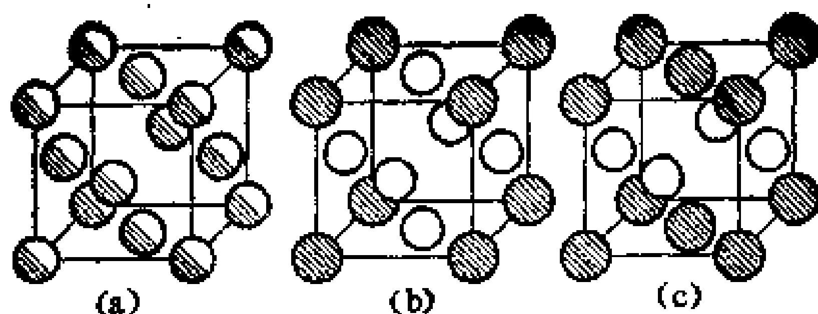


图 7-23 Au-Cu 固溶体的晶胞（a），Au、Cu 原子各占50%，每一个原子位置都有一个 Au-Cu“混合”原子，该合金有序化后的晶胞、Au、Cu 原子各占据固定的位置，该结构不再属于面心立方点阵（b）、(c)

Au、Cu 则在晶胞中占固定的位置，如图 7-23(b) 所示，这时点阵类型就改变了。

（二）电子化合物

IB 族的 Cu、Ag、Au 和某些其他元素与价电子数大于 1 的金属形成有趣的合金相，它们的结构特征由电子浓度决定，电子浓度是晶胞内每个原子平均具有的价电子数。称这些合金相为电子化合物，或 Hume-Rothery 相。

Cu-Zn 合金是这种系统的一个典型例子。其中的 β、γ 和 ε 相为电子化合物，它们的电子浓度分别为 3/2、21/13 和 7/4。这些值被认为是电子相最稳定的特征值。虽然这些相都有较宽的成份范围，但仍可分别用化学式 CuZn、Cu_5Zn_8 和 $CuZn_3$ 表示。

β 相为体心立方结构；γ 相为复杂的体心立方结构；ε 相为密排六方结构。γ 相的结构是以体心立方结构为基础，作某些变化而来。图 7-24(a) 是由 27 个体心立方晶胞三维堆积而成的大晶胞在 (001) 面上的投影，原子边的数字表示它的高度位置，以大晶胞边棱为 1。图 7-24(b) 是 γ 黄铜晶胞在 (001) 面上的投影，它是由 (a) 移去角中心与边棱上的一个原子，边棱处和其他原子位置作些变动而成。

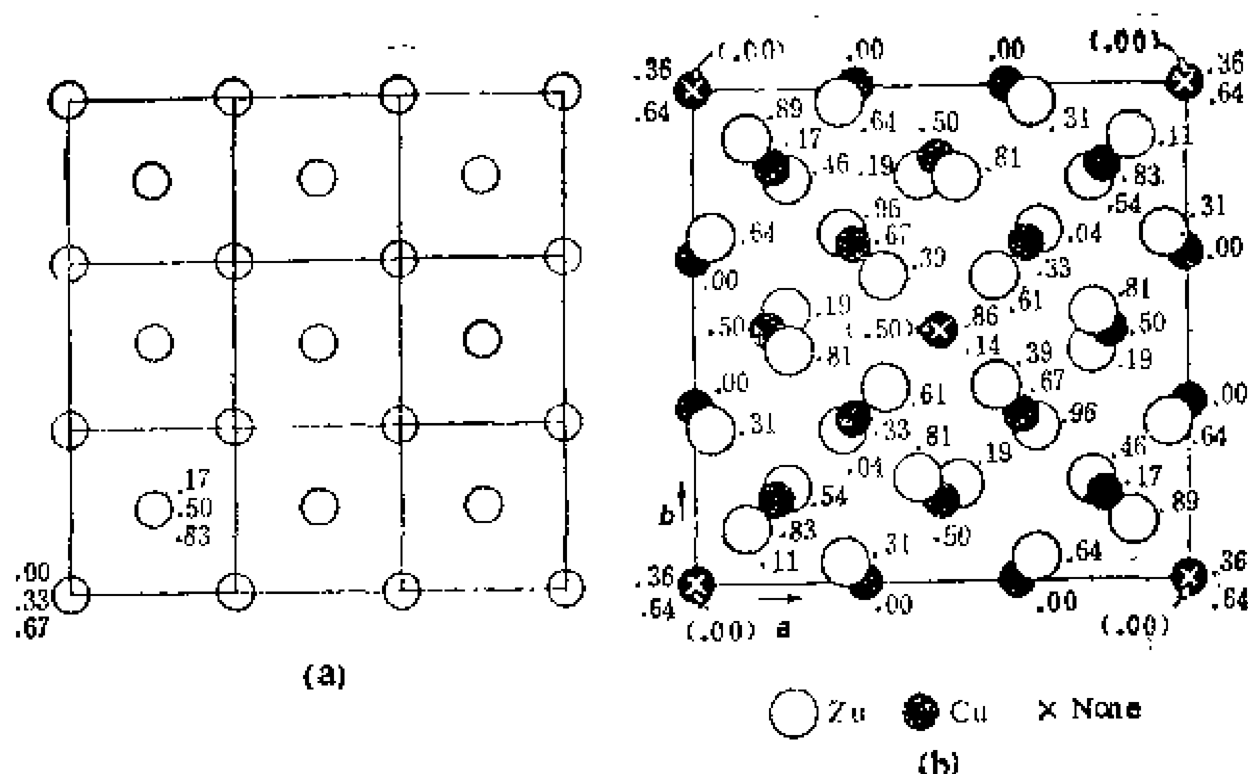


图 7-24　γ 黄铜结构

(a) 27 个体心立方晶胞堆积成的大晶胞在(001)面上的投影；
(b) γ 黄铜晶胞在(001)面上的投影. (b) 为由 (a) 去掉一些原子，变动一些原子位置而成

(三) 中间化合物

金属间化合物多数取图 7-25 中所示的结构形式。其中的 $MgCu_2$ 结构为 Laves 相的一种形式。Laves 相为主要由原子尺寸因素决定的金属间化合物，它的原子比通式为 AB_2，典型的结构有立方的 $MgCu_2$、六方的 $MgZn_2$ 和 $MgNi_2$ 结构类型。$MgZn_2$ 与 $MgNi_2$ 的结构极为复杂，这里不再涉及。

值得注意的是具有 A_3B 型式的一类化合物它们具有如图 7-18 所示的 β-W 型结构，B 类原子在体心晶胞的各个位置，A 类原子在结构的其他位置。V_3Si，V_3Ga，Nb_3Sn 等具有这种结构. 早已有人指出，这类结构具有良好的超导性。其中 Nb_3Sn 的最高超导临界温度为 18.05 ± 0.1°K。

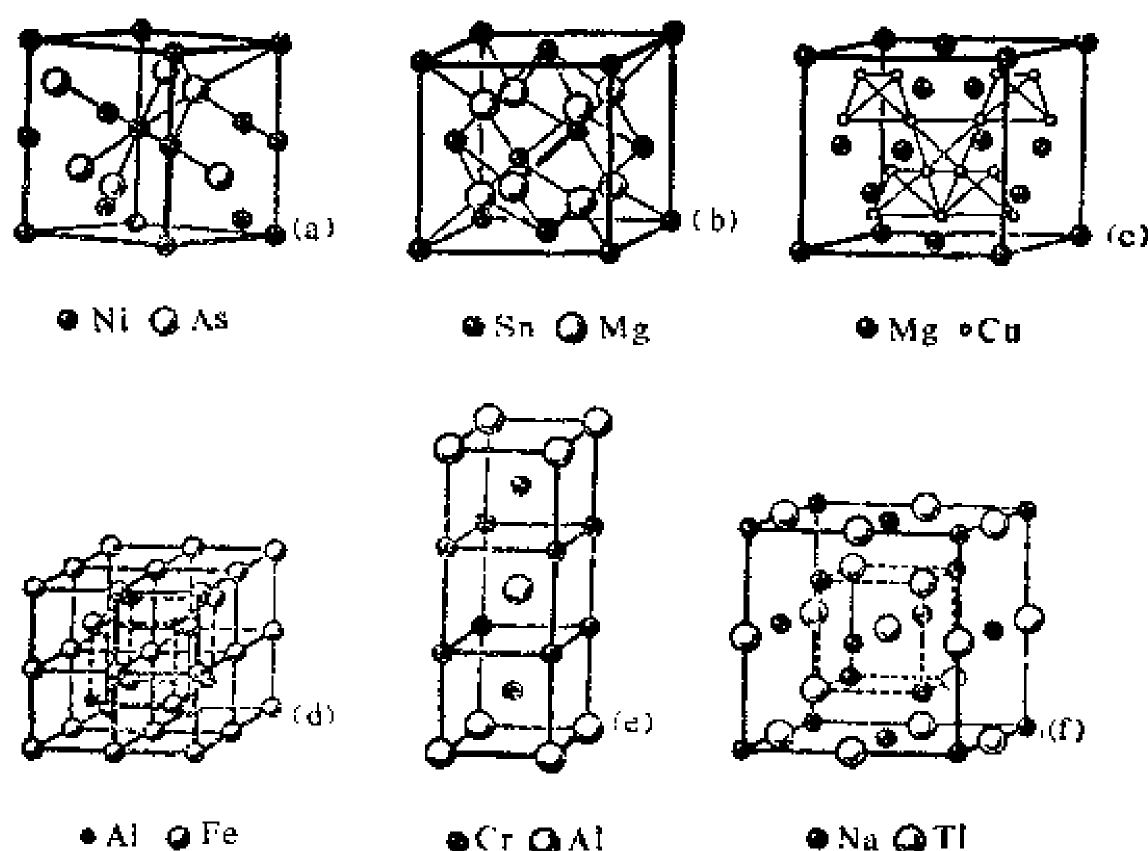


图 7-25 某些金属间化合物的结构
(a) NiAs; (b) Mg_2Sn, (c) $MgCu_2$; (d) Fe_2Al; (e) Cr_2Al; (f) NaTl

Co、Ni 和镧系元素 (R.E) 组成的二元合金中常有 B_5(R.E) 和 (R.E)B_2 两种形式的中间相。(R.E)B_2 是立方 $MgCu_2$ 结构；化合物 B_5(R.E) 为六方 Cu_5Ca 型结构，如图 7-26 所示。这类化合物的磁性是大家所关注的。

许多半导体化合物，如 GaA、GaP、GaSb、InSb、ZnSe、CdS 等，具有闪锌矿结构，如图 7-27(a) 所示，它的每个原子的平均价电子数为4。它实际上是金刚石结构中的原子交错地被 IIIB 和 VB 族或 IIB 和 VIB 族元素所代替而成。CdS 具有纤锌矿结构，如图 7-27(b) 所示。 PbS、PbSe、PbTe 为 NaCl 型结构，而 Mg_2Si、Mg_2Ge、Mg_2Sn 为反萤石结构。反萤石结构就是 CaF_2 结构、图 7-27(c) 中的F原子被金属元素所代替，Ca 被半导体元素所代替。

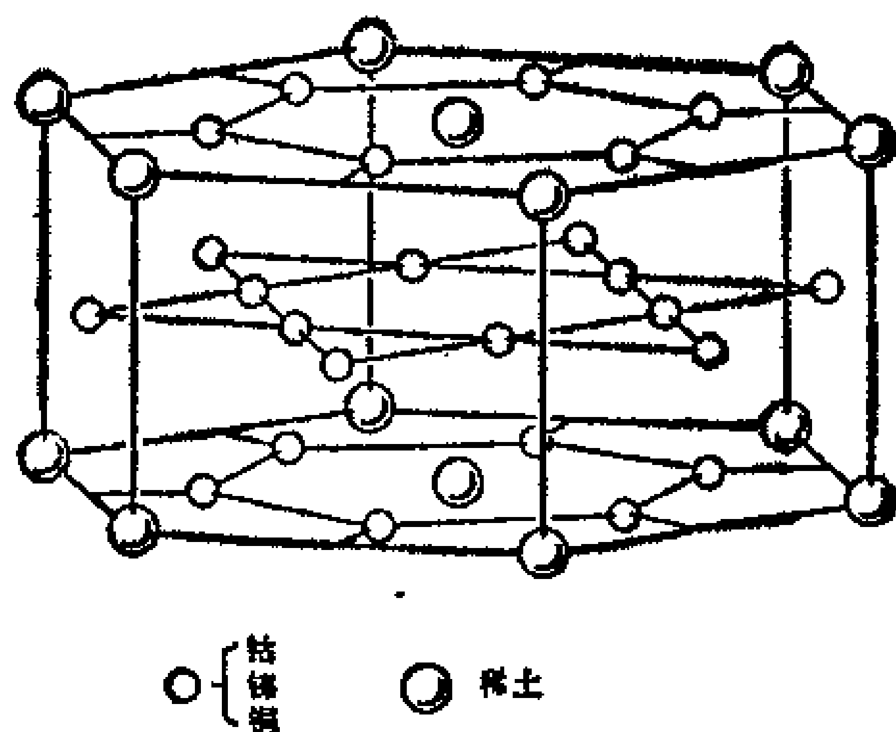


图 7-26　Cu_5Ca 结构，$Co_5(R.E)$、$Ni_5(R.E)$ 和 $Cu_5(R.E)$ 金属间化合物具有这种结构

此外，还有小原子嵌入到大原子结构的间隙中形成的间隙中间相。例如 Ti、Zr、Hf、V、Nb 和 Ta 形成稳定的碳化物和氮化物。金属原子以面心立方形成排列，*C* 或*N* 占据所有的八面体间隙位置。

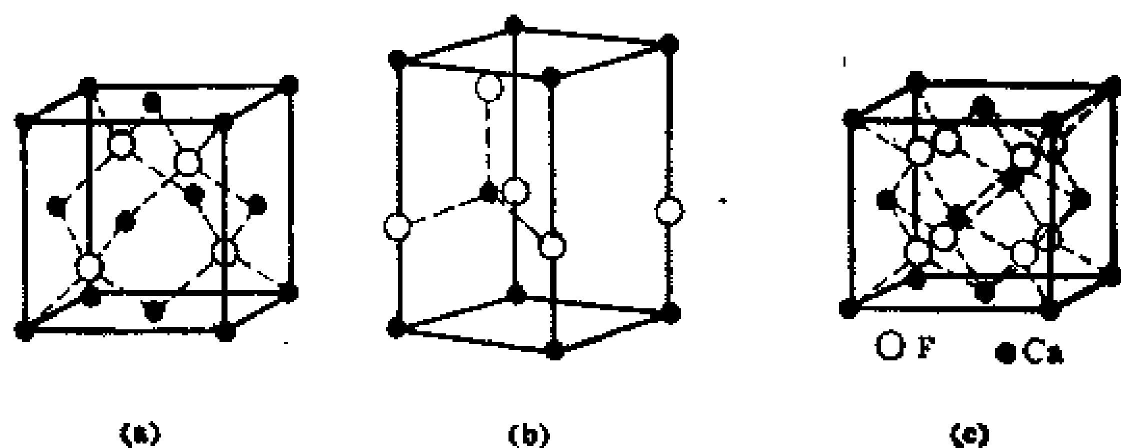


图 7-27　半导体化合物所具有的典型结构

(a) 闪锌矿结构；(b) 纤锌矿结构；(c) CaF_2 结构

四、具有离子键的晶体结构

(一) 卤化物、氧化物和盐的结构

卤化物、氧化物、硅酸盐、许多硫化物和无机盐都是具有离子键的结构。

碱金属的卤化物几乎完全是离子键结构。多数卤化物的结构相应于几何密排模型。主要有 NaCl、CaF_2、$CdCl_2$ 型，也会遇到如图 7-28 所示的 CsCl 型结构。

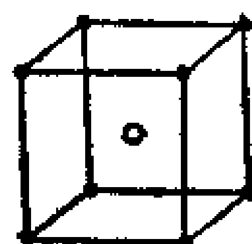


图 7-28 CsCl 结构

许多氧化物 MgO(NaCl 型结构)、Al_2O_3 等也是建立在密排基础上，金红石 TiO_2 结构为畸变的密排结构。复杂氧化物钙钛矿 $CaTiO_3$、尖晶石 Fe_2MgO_4、Fe_3O_4、Al_2NiO_4、Cr_2ZnO_4……和石榴石 $Ca_3Al_2Si_3O_{12}$、$Y_3Al_5O_{12}$……等都可以认为是以阴离子密排几何为基础，正离子或适当的化学式填充四面体和八面体间隙。图 7-29 为 TiO_2 和 $CaTiO_3$ 的结构。图 7-30 给出 $MgAl_2O_4$ 尖晶石的结构。每个晶胞包含 8 个分子。每个晶胞可以分成八个小立方体，它们具有两类结构。图 7-30(b) 中的影线立方体为 M 类、其他 4 个为 N 类，图 (c)、(d) 分别给出两类小立方体内的结构情况。

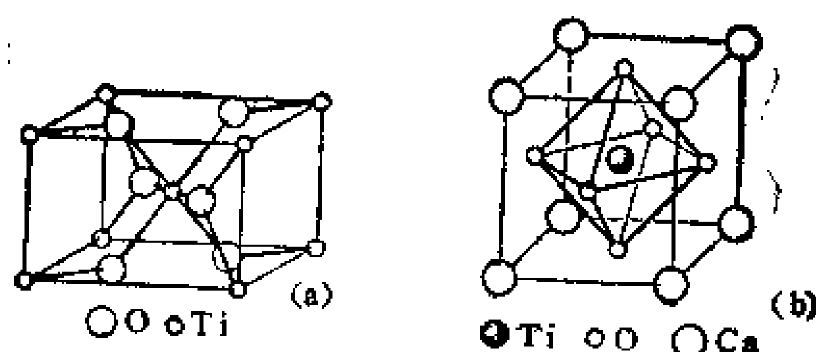


图 7-29 两种氧化物的结构

(a) 红金石 TiO_2 结构；(b) $CaTiO_3$ 结构

32 个氧原子密排会有 64 个四面体和八面体间隙，只有 24 个间隙被金属原子占据。这类材料具有重要的技术意义，如 $CaTiO_3$ 为铁电晶体，尖晶石和石榴石为有价值的磁性材料，$Y_3Al_5O_{12}$ 可作激光材料等。

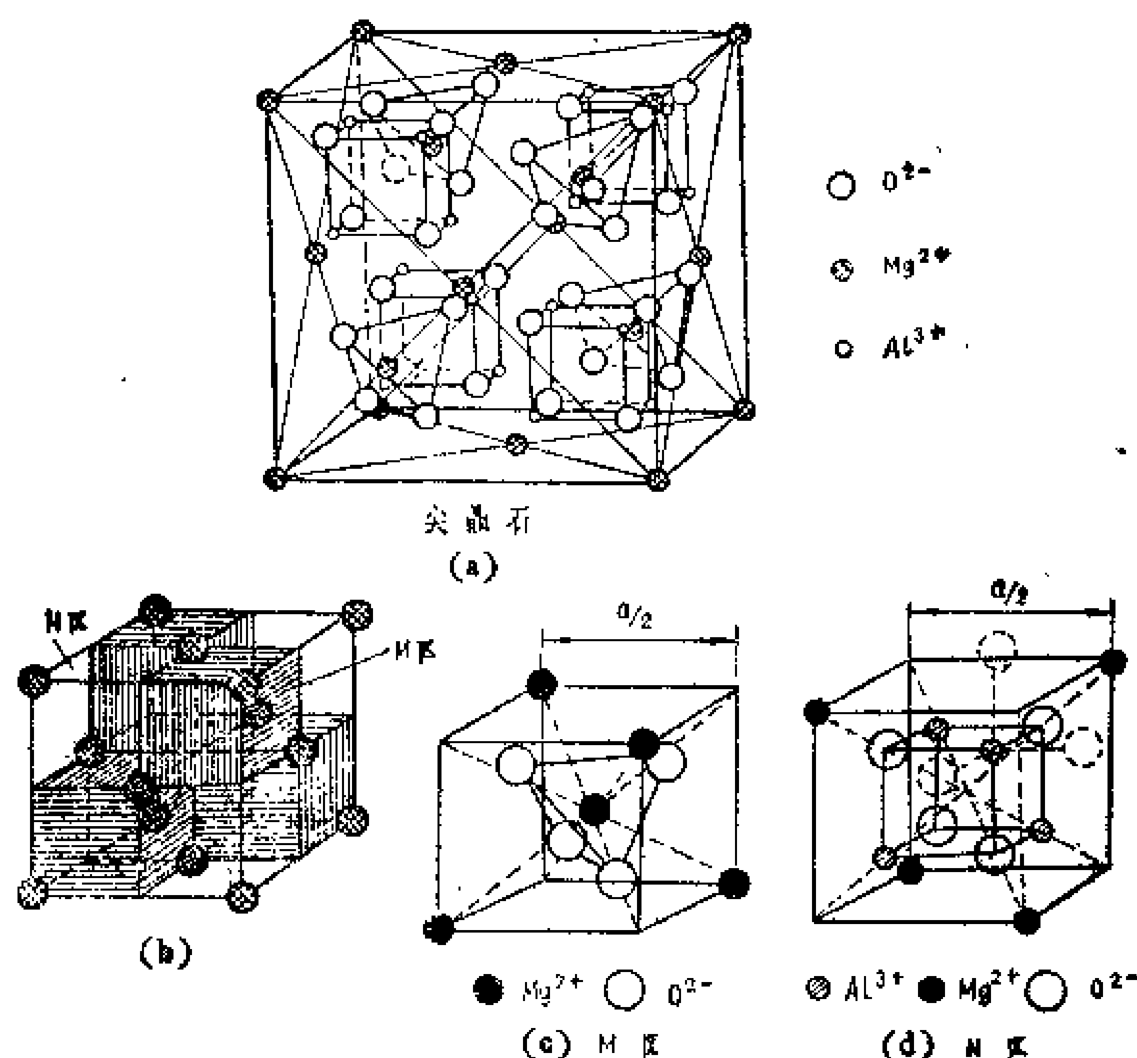


图 7-30 $MgAl_2O_4$ 尖晶石的结构

(a) $MgAl_2O_4$ 尖晶石结构；(b) 晶胞中的八个小立方体区；(c) *M* 区，即影线小立方体区中的结构；(d) *N* 区，即非影线区小立方体区的结构

无机盐具有较为复杂的阴离子团，例如 CO_3^{2-}、NO_3^{-}、SO_4^{2-}、PO_4^{3-}···，阴离子团内部为共价键，它们也以密排方式构成晶体，只是这时是某种形体的密排，不是球的密排。

（二）硅酸盐

硅酸盐是一类很重要的化合物，传统上将它划归为离子化合物，实际上它是由具有共价键的 SiO_4 四面体构成。

仅由 SiO_4 四面体构成的化合物为 SO_2，它有多种晶型，即石英、鳞石英和方石英，每种晶型又有低温和高温形态，分别记为 α 和 β。其中石英和鳞石英都是六方结构，方石英为立方结构。图 7-31 为方石英的晶胞。

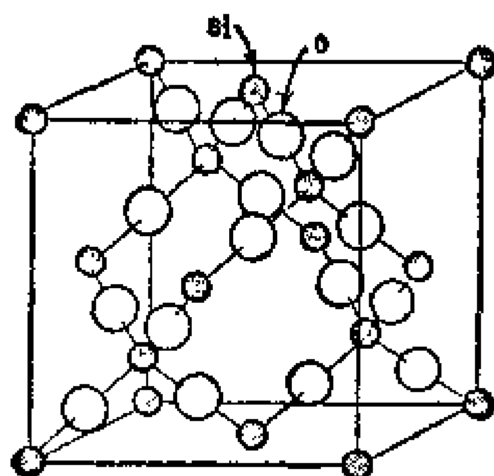


图 7-31　方石英的晶胞

$AlPO_4$ 的结构与石英相同，只是一半 Si 原子由 Al 代替，另一半由 P 代替。

各种金属与 SiO_4 中的氧离子结合，构成硅酸盐，这是地壳中的主要矿物。按硅-氧四面体在化合物中存在的形式可以把它们分成孤岛群，链状，层状和三维网络状。

在孤岛群结构中，SiO_4 可以是单独一个四面体，也可以是由

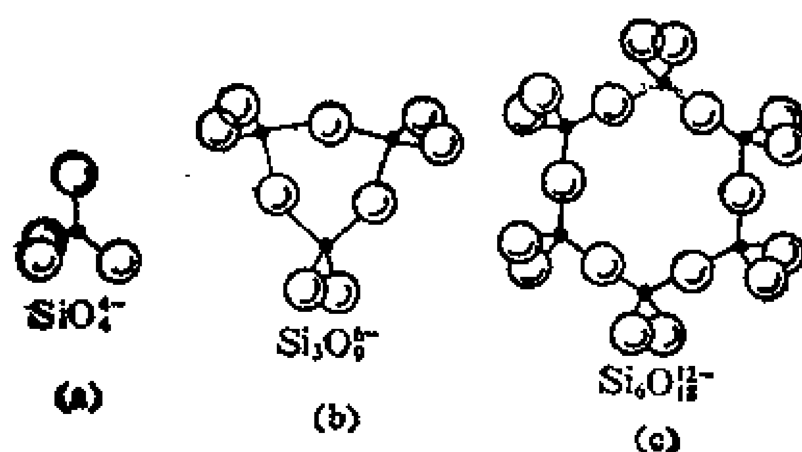


图 7-32　各种 SiO_4 孤岛的形式

(a) SiO_4^{4-}; (b) $Si_3O_9^{6-}$; (c) $Si_6O_{18}^{12-}$

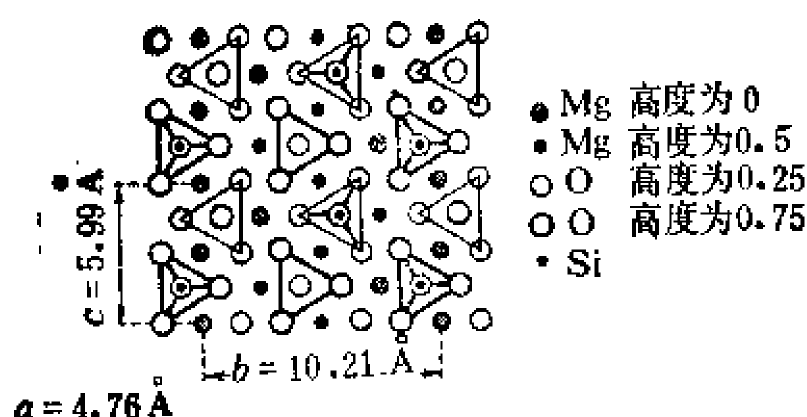


图 7-33　镁橄榄石结构在(100)面上的投影，各个孤立的 SiO_4 由 Mg 原子相维系

有限个 SiO_4 四面体组成的环，如图 7-32 所示。镁橄榄石 Mg_2SO_4 的结构中包含一个个孤立的 SiO_4，如图 7-33 所示。图中标明相对 a 轴的高度，它是在（100）面上的投影图。图 7-34 是绿宝石 $Be_3Al_2[Si_6O_{18}]$ 的结构，它是由六节环 SiO_4 孤岛构成，为六方晶胞。

图 7-35 给出由 SiO_4 四面体构成的各种链带，它们可分为单

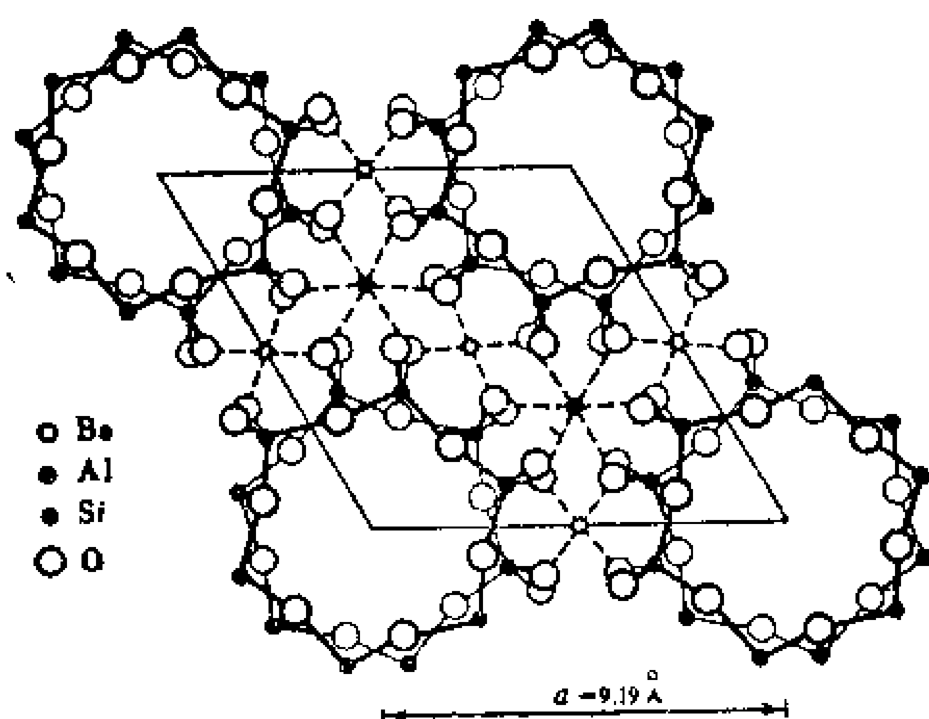


图 7-34　绿宝石 $Be_3Al_2[Si_6O_{18}]$ 的结构在(0001)面上的投影，SiO_4 构成 6 个组元的封闭环

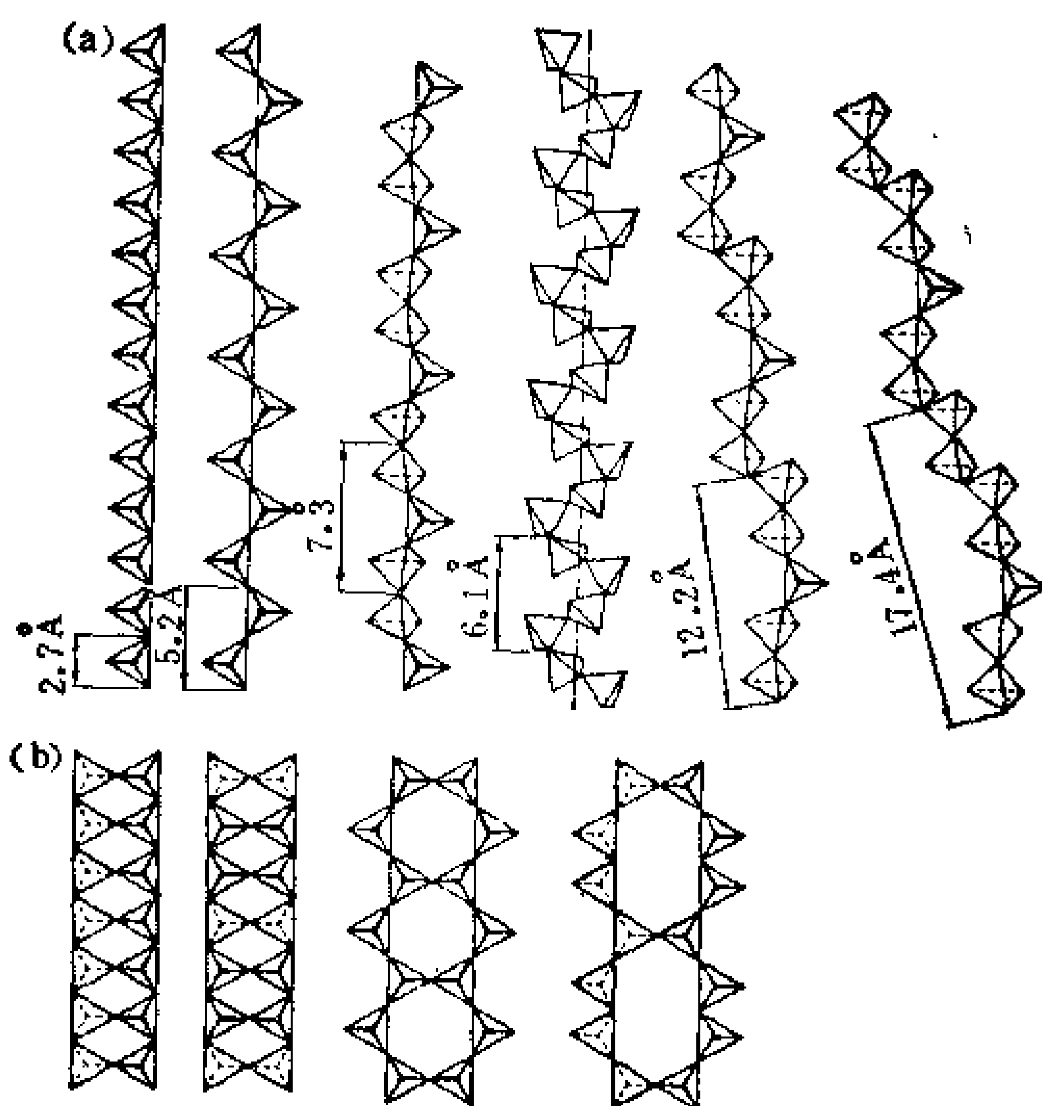


图 7-35　SiO_4 四面体的链状结构
(a) 单链；(b) 双链

链 (a) 与双链 (b).

具有层状结构的硅酸盐也是一种重要的类型，其中 SiO_4 四面体的排列如图 7-36 所示。四面体排列中不与其他四面体相连的顶角称为自由端。云母、滑石、高岭土、叶蜡石等都具有层状结构，这些结构的基本特征是由构成 Al 或 Mg 八面体表面的三角形与 SiO_4 四面体的自由端相连，也就是 Al 或 Mg 的八面体片与 SiO_4 的四面体片相结合成层。层状硅酸盐结构的多样化在于层中四面体与八面体配合的不同。四面体的取向不同、各种同晶置换的存在，以及以弱键与层相键合的大的阳离子、H_2O、有机分子层在四面

体和八面体层间的交错穿插。图 7-37 为滑石 (a)、绿泥石 (b)、高岭土 (c)、云母 (d) 和蒙脱石 (e) 的结构. 图 7-38 为高岭土在 (001) 面上的投影. 图中给出了原子的 c 轴高度, 该图主要说明 Al、Mg 八面体片与 SiO_4 四面体片之间的结合方式。

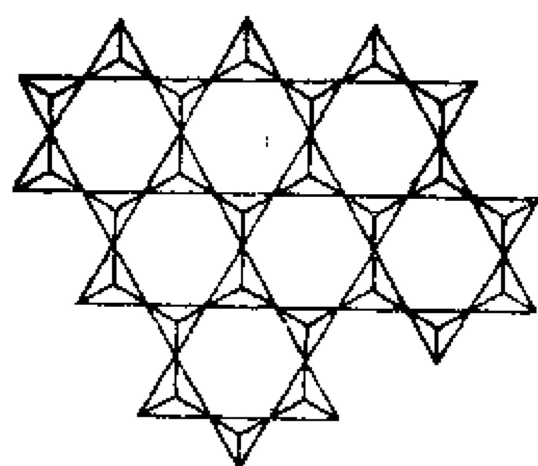


图 7-36 SiO_4 四面体排成的层状结构

SiO_4 形成的三维网络称为骨架，这类硅酸盐的技术重要性在于它可以作为分子筛，因为其中强的 SiO_4 三维骨架中有很多大孔，这些孔的大小决定着通过它的有机分子的尺寸。例如沸石具有 6 个组元的环，它有大约 3 Å 的孔道，

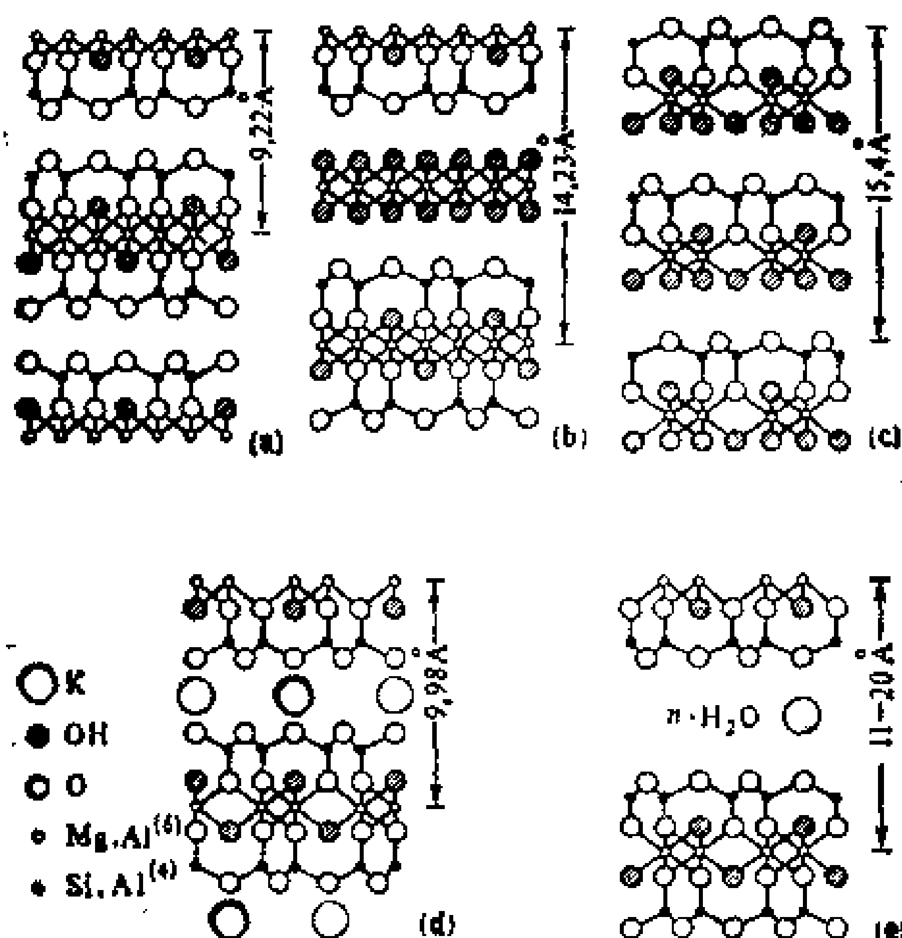


图 7-37 层状结构硅酸盐

(a) 滑石; (b) 绿泥石; (c) 高岭土; (d) 云母; (e) 蒙脱石

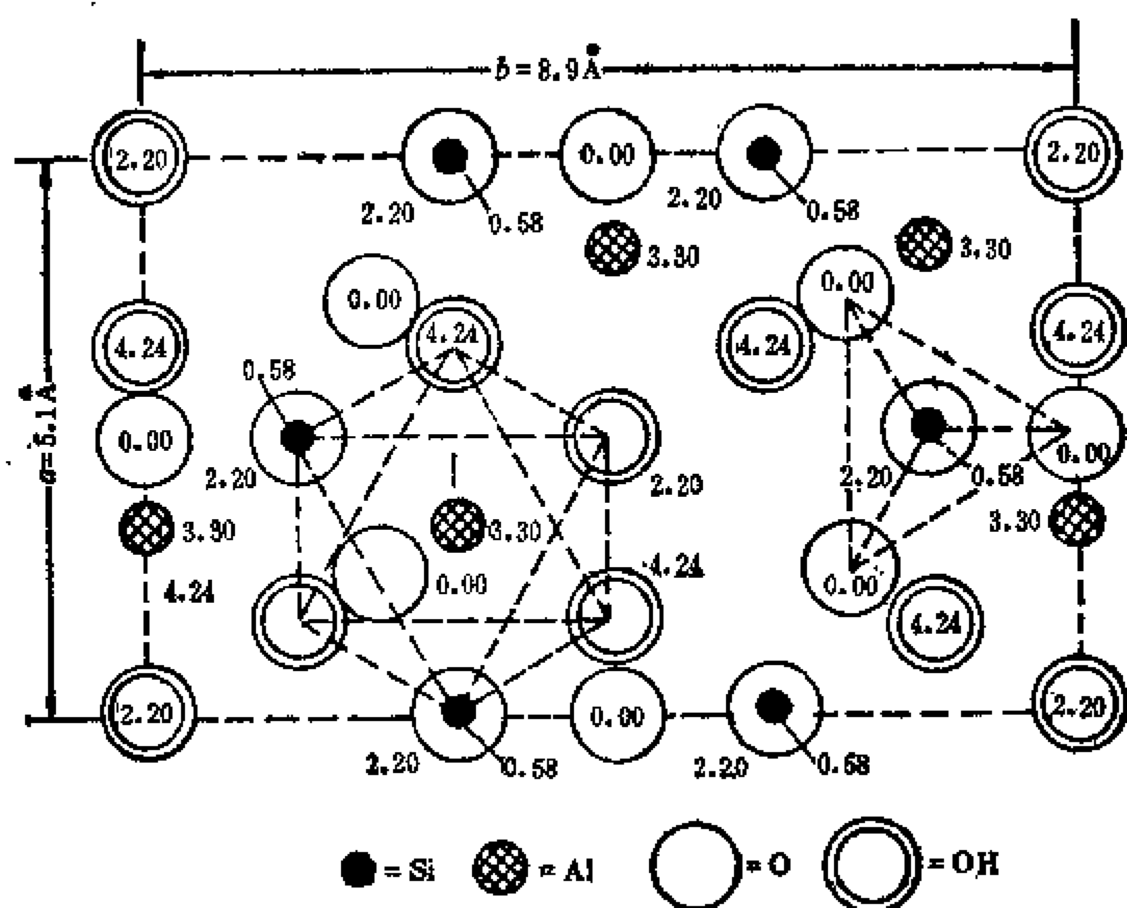


图 7-38　高岭土结构的(001)面投影，原子中的数字为其 c 轴高度，图中以实线绘出 SiO_4 四面体，以虚线绘出 Al 原子所在的八面体

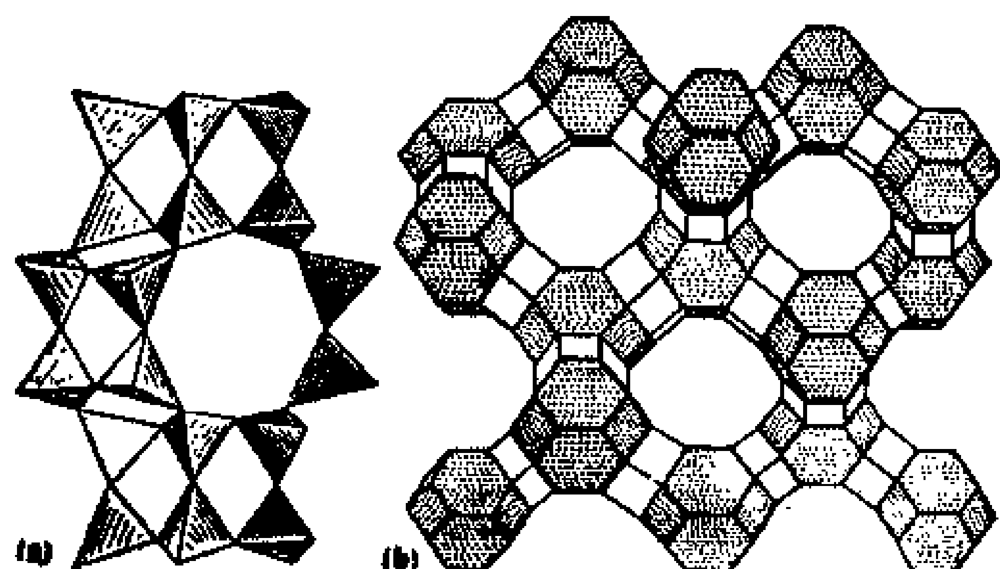


图 7-39　三维网络结构

(a) Cu_2FeS_4 结构中的窗；(b) Linde 分子筛结构，它允许直径为 8 Å 的分子通过

称为“窗”。其他分子筛的窗可由 8 或 12 个四面体组元构成，它们的尺寸可以达 13 Å。图 7-39(a) 是 Cu_5FeS_4 结构的窗，**(b)** 为 Linde 分子筛，它能允许 8 Å 直径的分子通过。

五、具有共价键的晶体结构

具有共价键的化合物主要由 IVB 和与它相近族的元素构成。由于共价键是强键，所以这类化合物的晶体通常具有高硬度和弹性。根据它们的电子谱可知它们是半导体或电介质。

我们知道，金刚石是典型的共价键结构。如果以 B 和 N 分别代替金刚石结构中的面心和内部位置，则形成极为坚硬的立方 BN 结构，这实际上就是闪锌矿结构。与此相似 IIIB、VB 族化合物 $A^{III}B^{V}$，如 GaP、GaAs、CaSb、InAs 与 AlP 和 $A^{II}B^{VI}$ 化合物，如 BeO、ZnO、ZnS、ZnSe、CdS、CdSe 和 HgSe 等半导体材料都具有闪锌矿型结构。只是它们中间包含的离子键或金属键成分不同。例如 BN 仅有 15% 的离子键成分；BeO 就有 40% 的离子键成分。这些化合物中每个原子的平均价电子数目为 4。

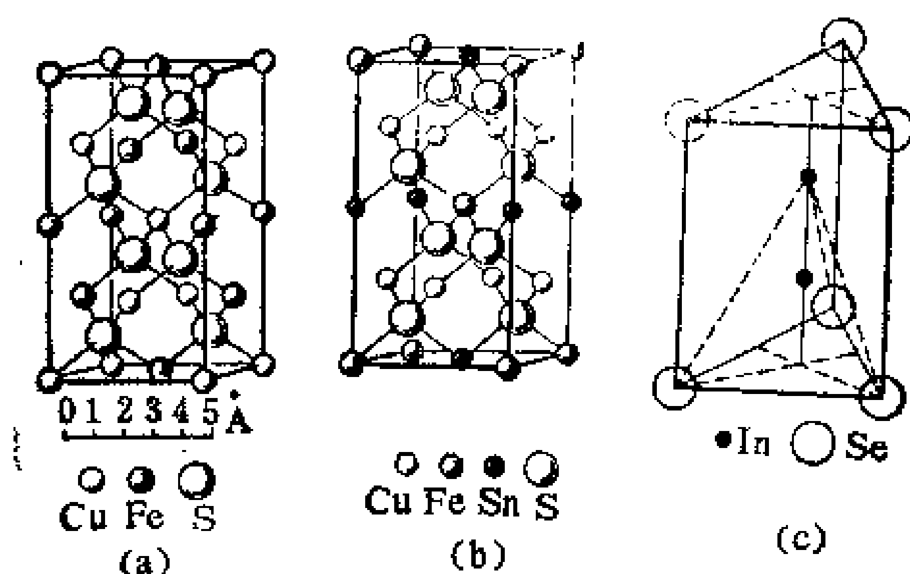


图 7-40 两种常见的共价键结构

(a) 和 (b) $CuFeS_2$ 型结构；(c)InSe 型结构

对于具有 $A^{II}B^{IV}C_2^{V}$，$A^{I}B^{III}C_2^{VI}$ 等形式的化合物具有 $CuFeS_2$ 型的结构，如图 7-40(a)、(b) 所示，如 $CdSnAs_2$、$AgInSe_2$ 等，InSe 结构如图 7-40(c) 所示。

六、有机化合物

有机化合物的结构单元为分子．分子内部为共价键结合，而分子之间是以范德瓦尔键或氢键结合．由于氢键(3 000—10 000Cal/mol) 比范德瓦尔键 (1 000—3 000Cal/mol) 强，所以前者常为链状结构，后者常形成孤岛状结构。

化学式简单的分子对称性较高，通常为 1、$\bar{1}$、2、3、222、m、$mm2$ 等，如图 7-41 所示。有的分子具有五次轴的对称性，例如图 7-42 中的 $Fe(C_5H_5)_2$ 分子，其点群为 $\bar{5}m$. 也有的分子具有七次或更高次轴．但当分子的构造变得复杂时，它们就减低或消失了对称性。

有机分子构成晶体时，仍以最大的填充空间为原则，同时，结构单元的对称性要与晶体的对称性相适应．例如萘(卫生球) $C_{10}H_8$ 晶体的空间群为 $P2_1/c$，如图 7-43(a) 所示，螺旋轴和滑动面的存在使晶体结构更紧凑；三叠氮氰尿酸分子具有 $\bar{6}$，它的晶体具有 $P6_3/m$ 空间群，如图 7-43(b) 所示，两者的对称性相适应，乌洛托品 $C_6H_{12}N_4$ 分子的对称性较高，点群为 $\bar{4}3m$，它的晶体结构如图 7-43(c) 所示，对称性也较高，空间群为 $I\bar{4}3m$.

分子晶体为绝缘体，因为它的电子都定域在分子内部。

七、高聚物、液晶和生物有机体的结构概述

高聚物、液晶和生物大分子联合体的结构，与前面谈到的晶体的三维周期性结构不同，它们仅包含某种原子的有序结构和确定

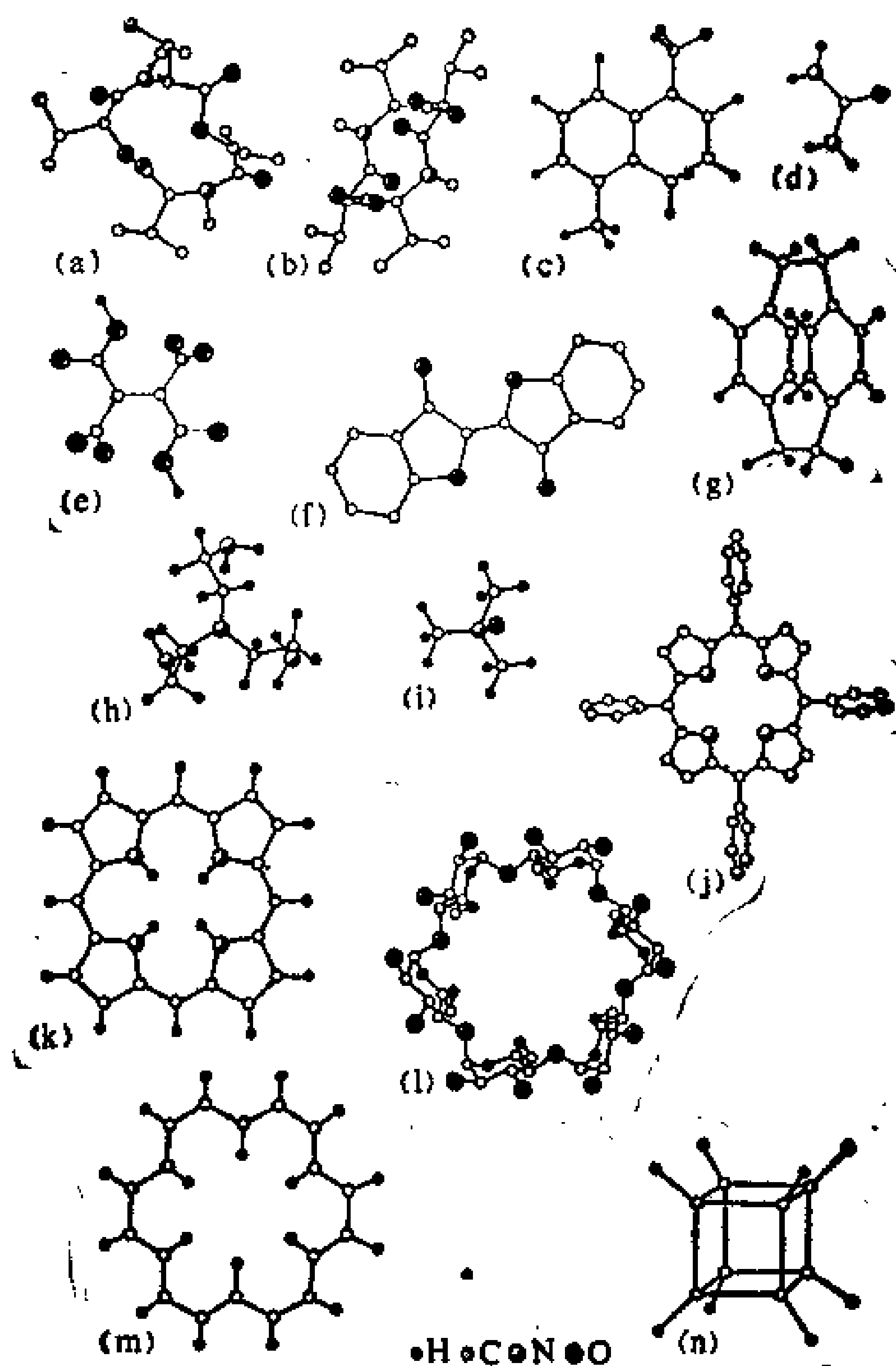


图 7-41 有机分子中通常具有的对称性

(a) 1; (b) $\bar{1}$; (c) $2/m$; (d) $mm2$; (e) 2; (f) $2/m$; (g) mmm; (h) 3; (i) $3m$; (j) 422; (k) $4/mmm$; (l) 622; (m) $6/mmm$; (n) $m\bar{3}m$

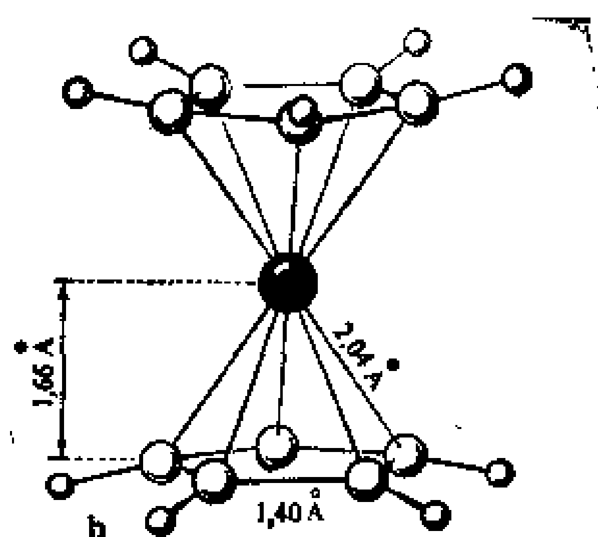


图 7-42　$Fe(C_5H_5)_2$ 分子的结构，它具有 $\bar{5}m$ 点群

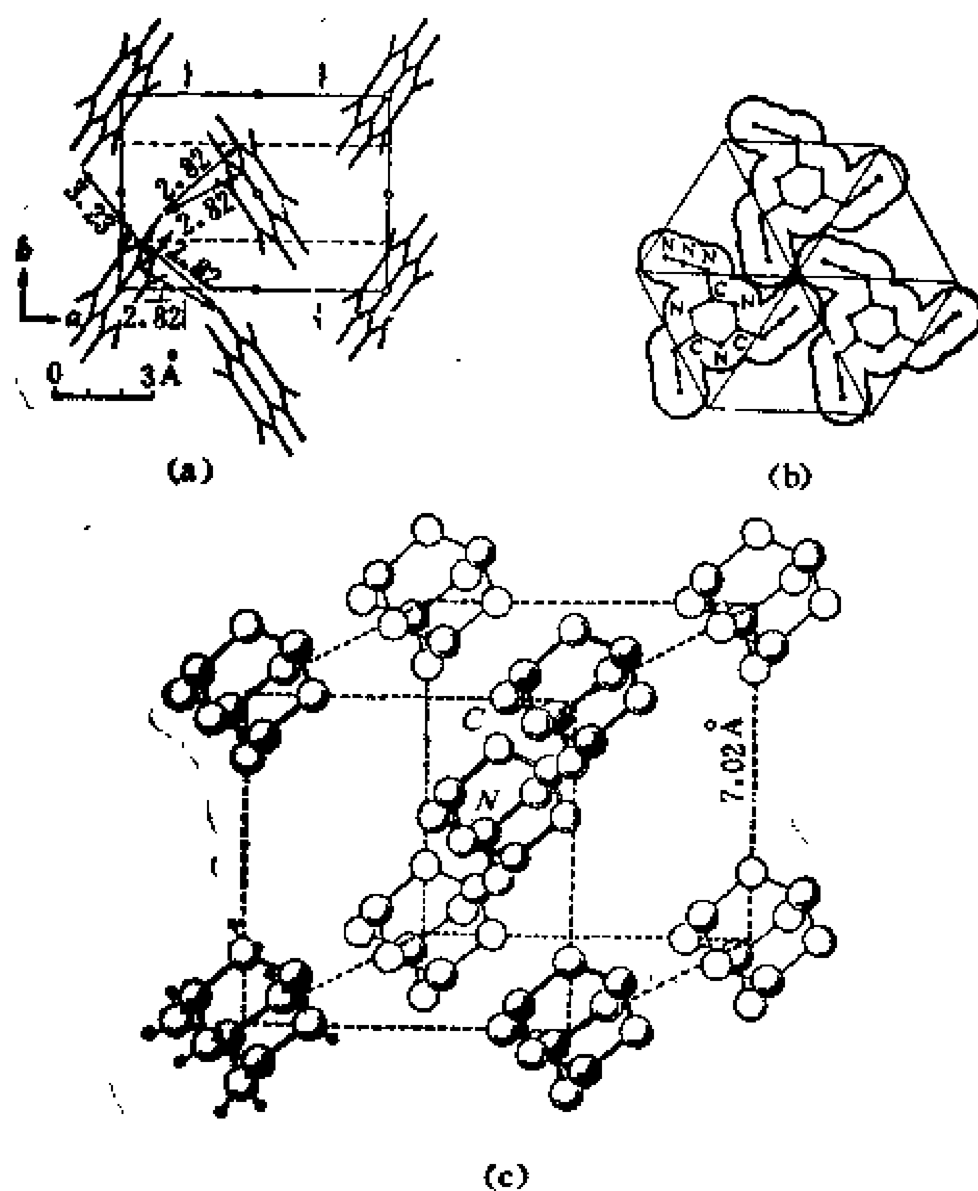


图 7-43　分子的对称性与晶体结构

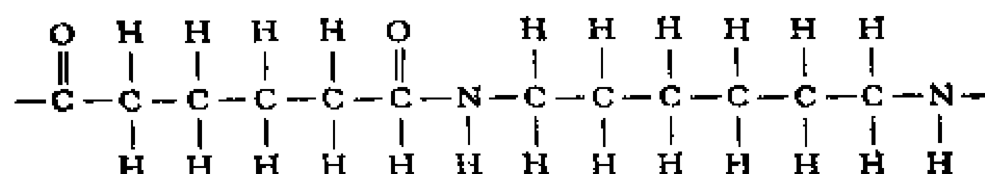
(a) 萘；(b) 三叠氮氰尿酸；(c) 乌洛托品

的对称性，有的地方与晶体很相近，有的地方则完全背离晶体。

由于这类物质在工业、技术与生命科学中的重要性，所以在这里略加介绍。也可以认为它们是广义晶体学的研究范围，因为研究这些物质结构的工具仍然是X光、电子衍射和电子显微镜，它们的结构有序规律是晶体规律的一种扩展。

（一）高聚物的结构

高聚物都具有长链分子。分子由主脉和侧基形成，主脉可能是简单的原子链，如图 7-44(a) 所示，也可能是包含一种或多种原子团的复杂链，如图 7-44(b) 所示，c 为重复周期。长链分子是具有一维周期性的三维结构。例如尼龙 66 的重复单元为



高聚物分子中的周期性重复往往不是严格的，而是统计的。

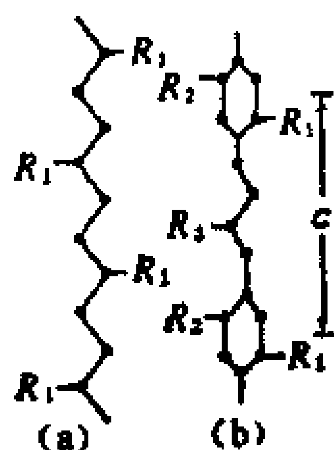


图 7-44 高聚物分子中的主脉、侧基 R 与重复周期 c
(a) 由原子链构成的简单主脉；
(b) 包含一个原子团的复杂主脉

如果两个重复单元的主脉轴 OO' 与 $O'O''$ 之间的夹角为 α，图 7-45(a)，重复单元的自转角为 ϕ，而主脉轴 $O'O''$ 绕 OO' 轴的转角为 φ，则重复单元之间的连接方式如图 7-45(b) 所示。图 7-46 为聚苯乙烯分子的结构。

长链分子的横截面一般小于 10 Å，对于复杂的生物聚合物，则可以达几十个埃。

虽然高聚物的分子链之间可以像尼龙 66 那样由氢键结合在一起形成晶体，如图 7-47 所示，然而由于分子链过长，主脉有支化，侧基又多，所以它们之间相互缠结，

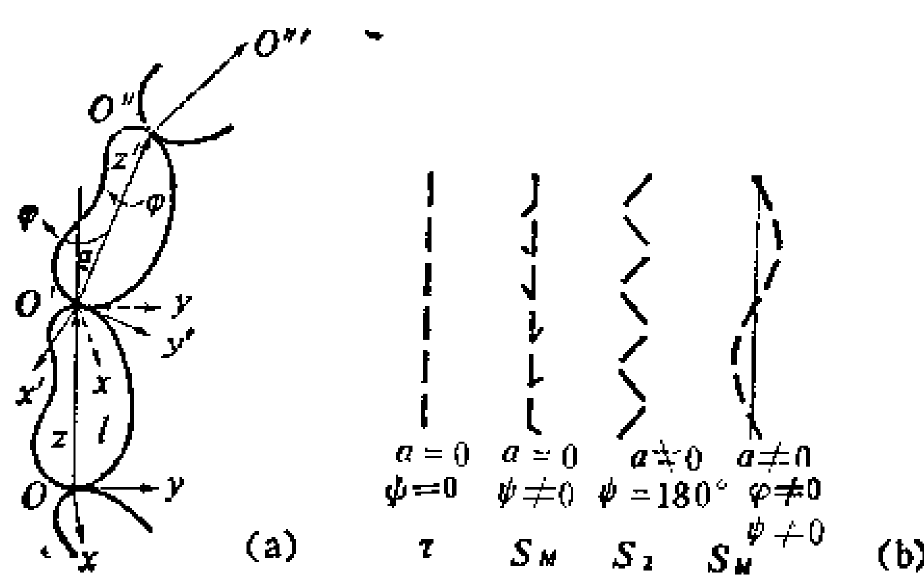


图 7-45　高聚物分子的一般结构

(a) 结构单元之间的关系；(b) 它们在分子中的安排方式

很难拉成直线，排成规则的晶体。对整个聚合物固体而言，内部总是有分子排列规则的晶态区与分子排列无规则的非晶态区。而达到有序平衡的程度取决于分子特征、凝聚的时间和进一步的处理。一般情况下，晶态区的范围仅几十或几百个埃。同时，一个分子可以穿过几个晶态区和非晶态区。

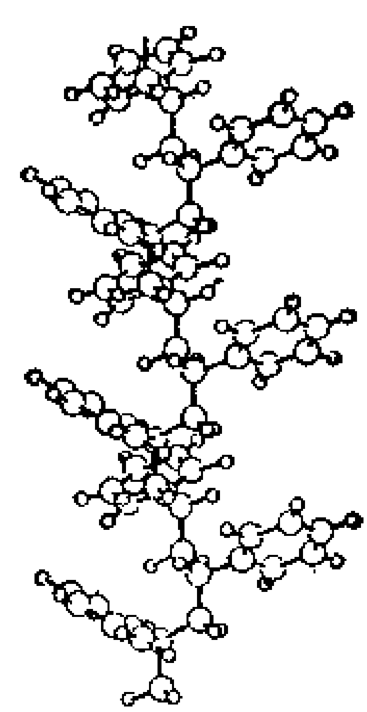


图 7-46　聚苯乙烯分子的结构

某些聚合物在特定条件下会形成晶体，这时可以用晶胞描述它的结构。图 7-48(a) 为石蜡 C_nH_{2n+2} 晶胞在平面上的投影；图 7-48(b) 中的虚线为聚乙烯对苯二酸的晶胞。高聚物晶体多是由长链分子多次弯折而成，如图 7-49(a) 所示，这种晶体层的厚度一般为 100—150 Å. 如果熔化的高聚物具有一定的速度梯度，其结晶时可能产生纤维晶体，这是一种分子链的

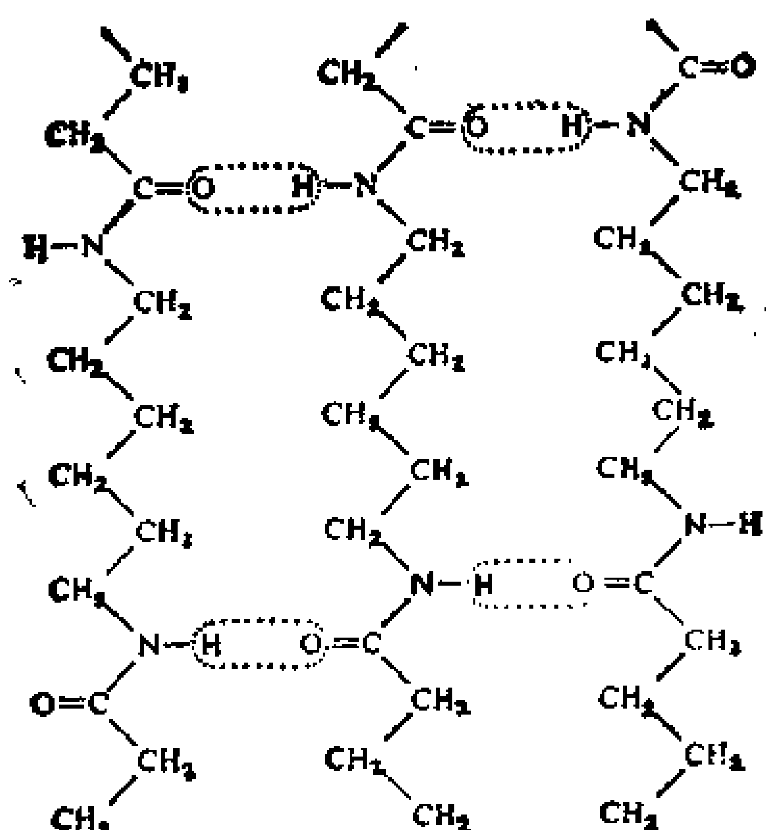
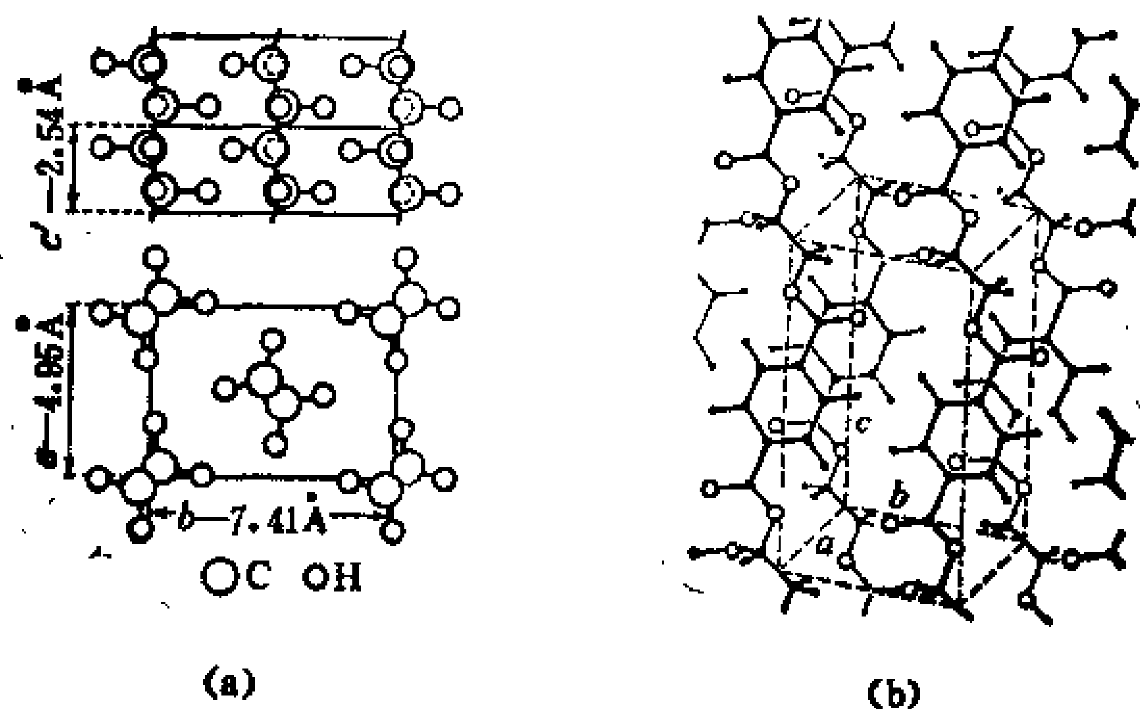


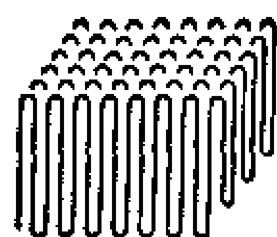
图 7-47　尼龙 66 晶态时的分子安排，分子链之间由氢键结合



(a)　　(b)

图 7-48　高聚物中的晶胞

(a) 石腊晶胞的二维投影；(b) 聚乙烯对苯二酸的晶胞



(a)



(b)

图 7-49　聚物晶体中分子的弯曲与褶叠方式

(a) 晶体层片的形式；

(b) 有趣的纤维晶体











图 7-50　几种液晶分子的形态

有趣排列方式，如图 7-49(b) 所示.

(二) 液晶

有一类有机物质能够形成液晶. 液晶中的分子既不像固体中那样三维有序，也不像液体中那样完全无序，而是介于两者之间的状态. 由于液晶中呈现着某种有序状态，所以它是各向异性的. 液

晶又称为介晶态相，它存在于确定的温度范围 t_{lc} 到 t_l 之间，t_{lc} 代表固态转变成液晶的温度，t_l 代表液晶转变成各向性液体的温度。

形成液晶的分子近于拉长的球形，对称性很低或根本没有对称性，如图 7-50 所示。通常是苯环或其他芳香族在分子中间，并且至少在分子的一端具有碳氢化物的"尾巴"。

液晶的有序方式基本上有两种，即图 7-51(a) 所示的向列相与 (c) 所示的近晶相，而 (b) 所示的胆甾相只不过是向列相的一种变态，向列相液晶中分子重心的分布是无规则的，只是绕长轴转动着的分子在统计上有一定的取向，即分子的长轴近于平行。我们说胆甾相为向列相的变态，是因为胆甾相液晶中仅是单分子层内为向列相，而分子层之间的取向有一绕层垂直轴的转动。重复周期往往有几千埃。在近晶相液晶中分子的长轴是相互平行的，但分子是按层排列的。近晶相有序度较高，因为当一种物质即可呈现近晶相又可呈现向列相时，前者是在较低温度下的相。例如液晶 BT 在 70°—73.5℃ 之间为近晶相，73.5°—76℃ 为向列相。

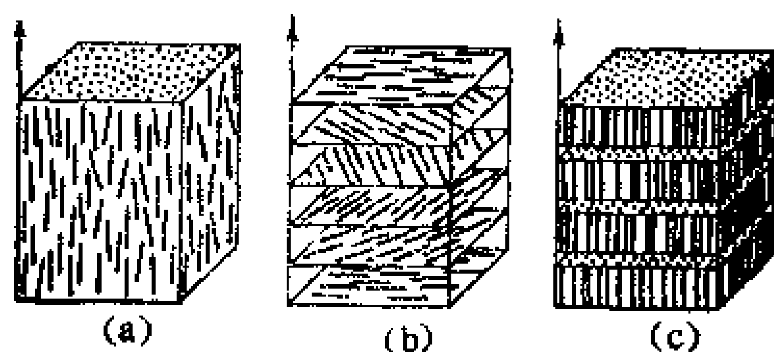


图 7-51　液晶中的分子安排
(a) 向列相；(b) 胆甾相；(c) 近晶相

近来又发现了由圆盘状分子构成的液晶。例如图 7-52(a) 中所示的盘状分子可以一层层叠起形成圆柱，这些圆柱就是液晶的结构单元，如图 7-52(b) 所示。对于不同的液晶，柱轴能呈六方或矩形有序，也可以倾斜。

上面描述的是在液晶中特定微观区内的情况，即畴内的状况。

在通常情况下，液晶中各个畴之间没有取向关系；在特定的情况下会形成特种类型的织构，例如由于拉伸、流动、加电场或磁场都会使液晶，即它们的畴取向化。

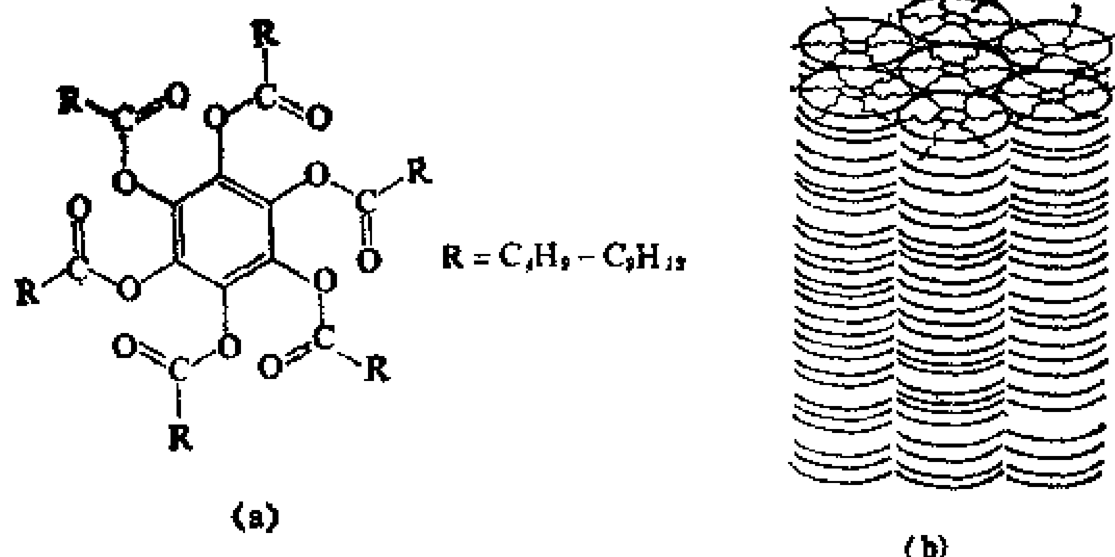


图 7-52 盘形分子液晶

(a) 液晶的盘形分子；(b) 由盘形分子构成的柱在液晶中的排列方式之一

（三）生物有机体的结构

从自X光衍射出现以来，人们就开始注意生物体的结构，但由于这些物质的结构极为复杂，又缺少较为综合性的数据，所以长时间来未能很好地解释这些结构。二十世纪中期以后，研究工作才活跃起来。特别复杂的研究客体刺激了X光方法和晶体结构计算技术的改善，促进了对称理论和分子晶体化学中新概念的揭示。研究结果又促进了生物学的发展，目前已可以利用种种有机分子，包括蛋白质、核酸、病毒、维他命等的原子结构数据。一门新的科学，即分子生物学正在兴起，它的最有效的工具是广义晶体学和强有力的X光技术，自然，从高分辨率电镜也获得有价值的数据。

虽然这是一个很有意义的领域，但由于本人力不能及，所以这里只能作极为粗浅的介绍。

人们已对氨基酸、核酸、糖、肽、类固醇、激素、维他命、脂肪、蛋白、病毒等的结构作了研究。这些晶体的链或晶胞的周期有的是几十埃，有的达 2000 Å，如病毒。它们的分子或晶胞内的原子数目可以达 10^2 个，如氨基酸，有的竟达 10^6 个，如核蛋白和病毒。由此可见，它们的结构是极其复杂的。

脂肪是一类有趣的生物结构，它有一个带尾巴的长形分子，其中最简单的是脂肪酸，$C_nH_{2n+1}COOH$ 的分子。它们在水溶液中的行为很特殊，有时它们像近晶相液晶那样构成层状，疏水的尾巴相对，如图 7-53(a) 所示，有时则构成由单分子或由双分子形成的球，如图 7-53(b) 和 (c) 所示。

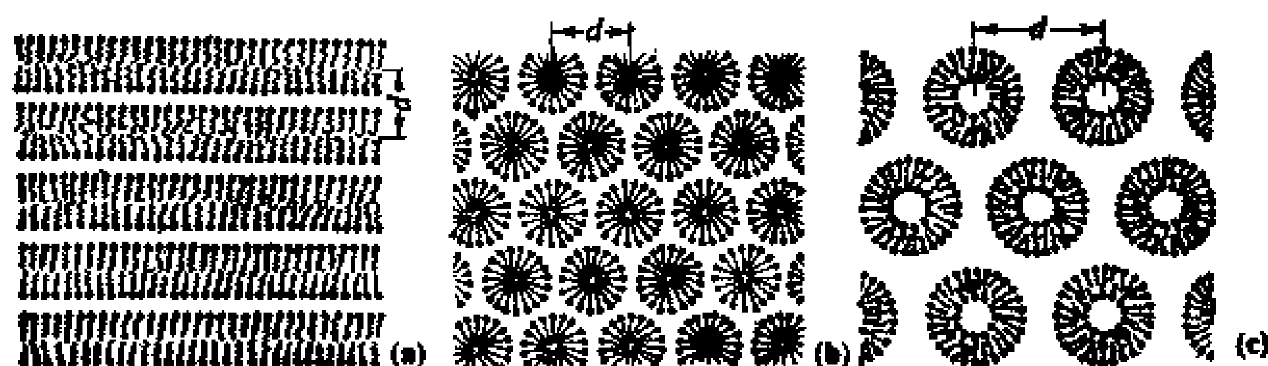
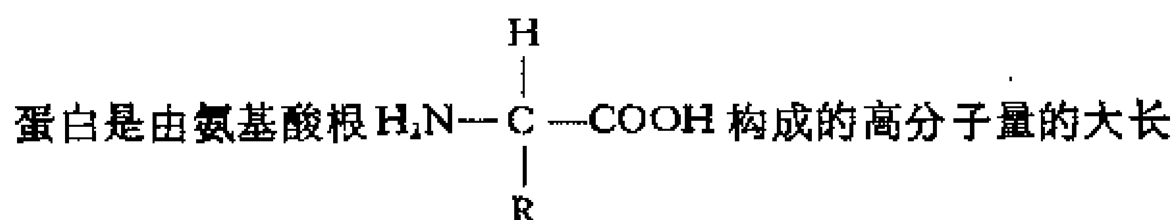


图 7-53　脂肪分子在水溶液中的有序状态

(a) 层状；(b) 由单分子形成的球；(c) 由双分子形成的球



蛋白是由氨基酸根 $H_2N—\overset{\displaystyle H}{\underset{\displaystyle R}{C}}—COOH$ 构成的高分子量的大长链分子。侧基 R 可以是 H、CH_3、CH_2⟨⟩…，如图 7-54 所示，由不同的侧基可以形成甘氨酸、丙氨酸、苯基丙氨酸、色氨酸、酪氨酸……。图中给出各种氨基的代表符号，这一般是其英文名称的前三个字母。这些侧基中有的是中性的，即疏水的，有的是极性的，如 OH^-、NH_3^+、$COOH^-$ 等，它们可以形成氢键或离子键。

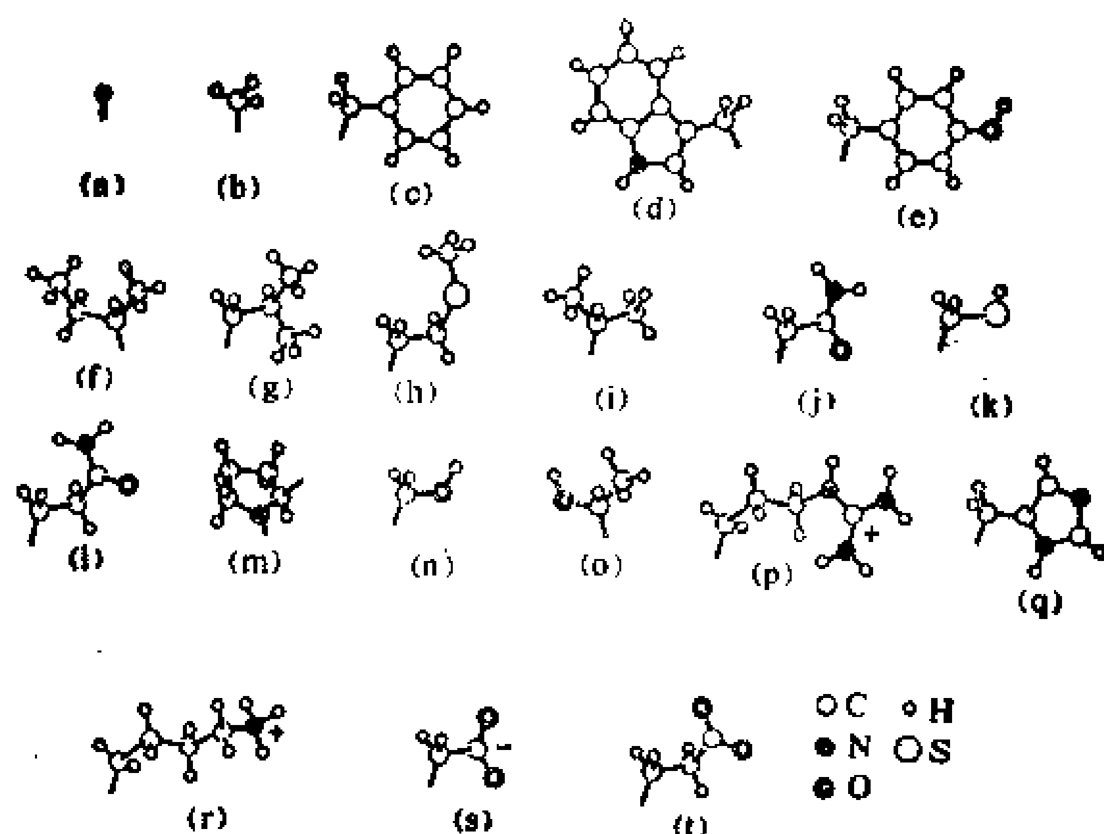
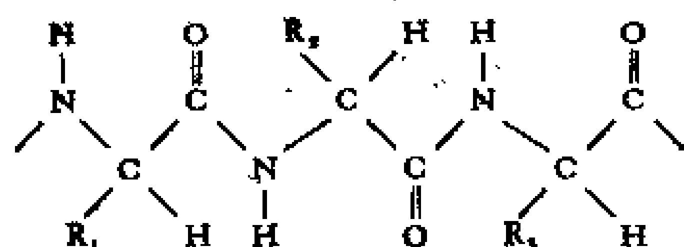


图 7-54 L-氨基酸的侧基

(a) Gly, (b) Ala; (c) Phe; (d) Trp; (e) Tyr; (f) Ile; (g) Leu; (h) Met; (i) Val; (j) Asn; (k) Cys; (l) Gln; (m) Pro; (n) Ser; (o) Thr; (P) Arg; (q) His; (r) Lys; (s) Asp; (t) Glu

氨基酸中的原子作些变动就可以结合成多肽键，它是蛋白结构的基础。



由于蛋白结构的复杂性，一般以下面的层次来描述它。首先是以氨基酸排列顺序图表示的分子式，称为初级结构，图 7-55 是鸡蛋溶菌酶的初级结构图，这离结构的充份描述相差甚远，因为链中的每一个单元和侧基都可以按不同的方式在三维空间安排，近一步的结构描述是蛋白中的多肽链是怎样借助氢键安排成确定的

构型，接着是具有一定排列的多肽链以怎样的规律褶叠和褶叠后的大分子中某些亚单元的组合，这种组合体通常具有特定的点群。最终是大量的分子结合成组织，如病毒、膜、管等晶体。

图 7-55　鸡蛋溶菌酶的初级结构——氨基酸根的排列顺序

图 7-56　牛肝过氧化氢酶的电子显微镜照片

图 7-56 是牛肝过氧化氢酶的电子显微镜照片，它可以直接看到晶体中蛋白分子的有规律的堆积。图 7-57 是过氧化氢酶青霉属活体晶体中某晶带的X光旋进照片。

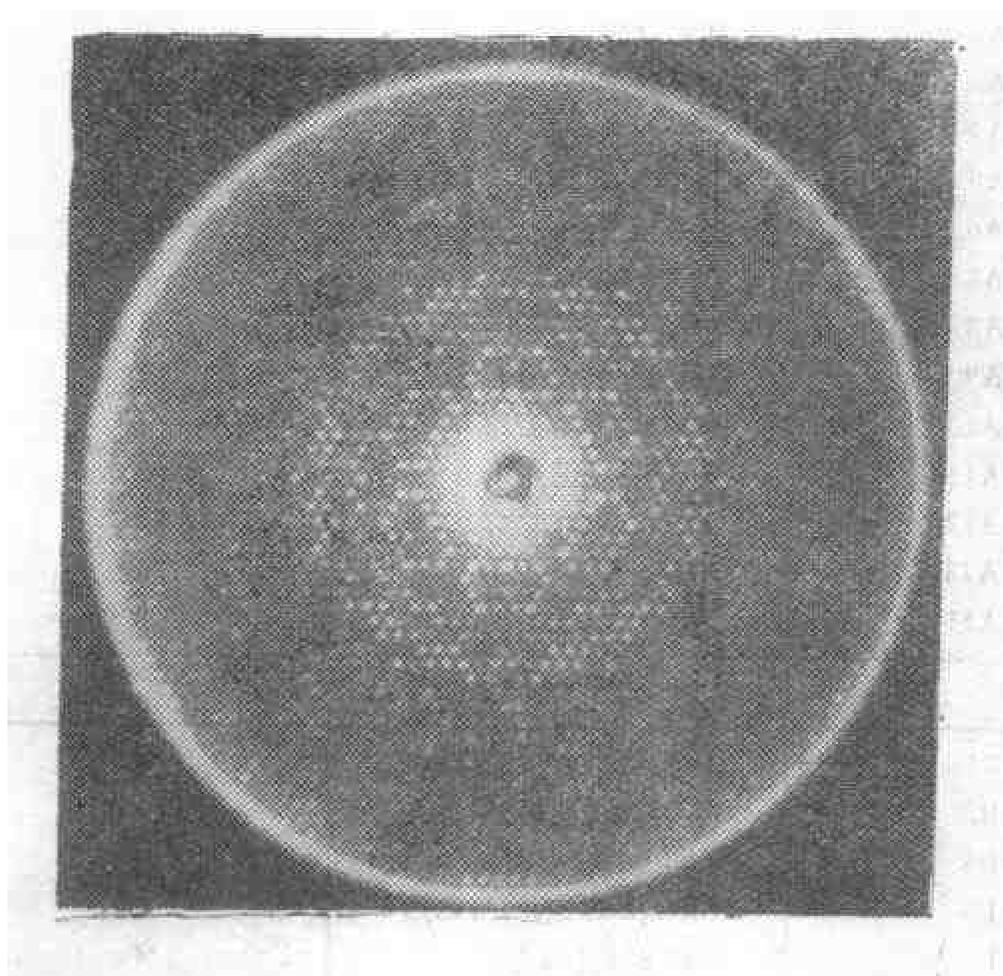


图 7-57 过氧化氢酶青霉属活体六方晶体某晶带的X光旋进照片

八、《结构报告》中使用的符号

1931 年开始出版结构通报 (Strukturbericht)，报导从 1913年以来所测定的晶体结构。该书从自 1940 年开始，改名为《结构报告》(Structure Reports)。表 7-3 介绍该报告中使用的常见结构类型的符号。

表 7-3 《结构报告》中使用的晶体结构符号

晶体结构符号	晶体结构类型	晶胞内分子(或原子)数
A 型	元 素	
A1	面心立方	4
A2	体心立方	2
A3	密排六方	2
A4	金刚石立方	8
A5	面心正方	4
A6	体心正方	2
A7	As 结构(菱形)	2
A8	Se 结构(六方)	3
A9	石墨结构(六方)	4
A10	汞结构(六方)	4
A11	Ga 结构(正方)	
A12	α-Mn 结构(立方)	58
A13	β-Mn 结构(立方)	20
A15	β-W 结构(立方)	8
B 型	AB 化合物	
B1	NaCl 结构(立方)	4
B2	CsCl 结构(立方)	1
B3	ZnS 结构(立方)	4
B4	ZnO、ZnS 结构(六方)	2
B5	SiC 结构(六方)	4
B6	SiC 结构(六方)	6
B7	SiC 结构(六方)	15
B8	NiAs 结构(六方)	2
B9	HgS 结构(六方)	3
B11	PbO 结构(正方)	2
B12	BN 结构(六方)	
C 型	AB_2 化合物	
C1	CaF_2 结构(立方)	4
C2	FeS_2 结构(立方)	4
C3	Cu_2O 结构(立方)	2

续表 7-3

晶体结构符号	晶体结构类型	晶胞内分子(或原子)数
C4	TiO_2 结构(正方)	2
C5	TiO_2 结构(正方)	4
C8	SiO_2 结构(六方)	3
C9	SiO_2 结构(立方)	8
C10	SiO_2 结构(六方)	4
C11	CaC_2 结构(立方)	4
C14	$MgZn_2$ 结构(六方)	4 }Laves 相
C15	$MgCu_2$ 结构	}Laves 相
C21	TiO_2 结构(正交)	8
C43	ZrO_2 结构(单斜)	4
D 型	A_mB_n 化合物	
D51	Al_2O_3 结构(菱形)	2
D52	La_2O_3 结构(六方)	1
E…K 型	更复杂的化合物	
G1	$CaCO_3$ 结构(菱形)	2
G4	$FeTiO_3$ 结构(菱形)	2
G5	$CaTiO_3$ 结构(立方)	1
H12	$(Mg、Fe)SiO_4$	4
L 型	合　　金	
L10	AuCu 结构	
L12	$AuCu_3$ 结构	
O 型	有机化合物	
O1	CH_4 结构(立方)	4
$O5_{11}$	$C_{14}H_{12}$ 结构(单斜)	4
S 型	硅 酸 盐	

练　习　题

1. 请给出下面金属的晶胞：Cu、Al、α-Fe、Cr、Zn 和 Zr。
2. 请写出上述晶体的密排面和密排方向指数。
3. 请写出 Al 和 α-Fe 的最大间隙位置。
4. 请指出 Al、α-Fe 和 Zr 的配位数、密排面法线方向上的对称性，并计算它们的堆积密度。
5. 请绘出 Si 的晶胞与阵胞。
6. 请绘出 NaCl、CaF_2、立方 ZnS 和六方 ZnS 的晶胞与阵胞。
7. 请绘出金刚石与石墨的晶胞与阵胞，并指出晶胞内原子的位置。
8. 金属 Pt 为 Al 型结构，点阵参数 $a=3.924$ Å，原子量为 195.0，试计算 Pt 的密度与原子半径。
9. Al 为面心立方结构，密度为 $2.70\mathrm{g/cm^3}$，试计算它的点阵参数与原子半径。
10. 已知 SiC 晶体具有六方 ZnS 型结构，晶胞参数为 $a=3.08$ Å，$c=5.05$ Å。C 原子的坐标为 000；$\frac{2}{3}\frac{1}{3}\frac{1}{2}$。Si 原子的坐标为 $00\frac{5}{8}$；$\frac{2}{3}\frac{1}{3}\frac{1}{8}$。

    请回答下列问题：

    (1) 请在坐标纸上绘出这个晶胞并绘出它的阵胞；

    (2) 请说明每个晶胞内包含几个 SiC；

    (3) 晶体结构中 Si 原子以什么方式堆积？ C 原子处在何种间隙中？

复 习 题

1. 请说明常见的密排方式有几种？
2. 请说明什么是配位数？面心立方、体心立方和密排六方结构中的配位数是多少？
3. 请写出你所知道的元素的晶体结构。
4. 结构报告中所用符号 A1、A2、A3、A4 和 B1 各代表何种结构，C1 和 O1 呢？

第八章　晶体中的投影变换

很难利用立体图形来描述晶胞中各个面的方位和它们之间的角度关系．引入投影变换的方法，特别是极射投影的方法，就能较为方便地解决这类问题．

一、球 面 投 影

球面投影是指将晶体中的晶面，晶向和它们之间的角度关系等都表达到一个球面上去的变换，称此球为参考球．

球面投影的方法是：取一半径极大(相对晶体而言)的球作为参考球，极小的晶体放在参考球的中心．可以用面痕法或极点法表示晶体中的晶面．面痕就是将晶体中的晶面延展开来时与参考球面的交线，例如图 8-1 中的大圆 $EFNS$，就是晶面 A 的面痕．所

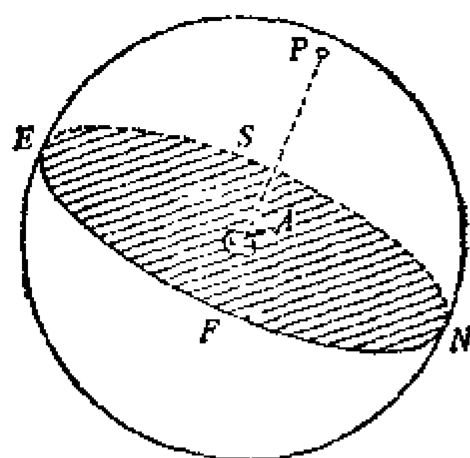


图 8-1　晶面 A 的面痕 $EFNS$ 和极点 P

谓大圆就是圆心在参考球中心上的圆. 极点就是面法线与参考球面的交点，例如图 8-1 中的 P 点就是晶面 A 的极点. 同一晶面的面痕与极点之间应处处为 90°. 晶体中的方向直接由它与参考球的交点表达，称此交点为该方向的迹点. 这样，就可以在球面上表达各个晶面或晶向的取向，和它们之间的角度关系.

图 8-2 给出两个晶面的面痕 $ABCD$、$EDFB$ 和极点 P_1、P_2. 利用大圆 $LMNK$（图中的虚线）可以方便地测出这两晶面之间的夹角 α.

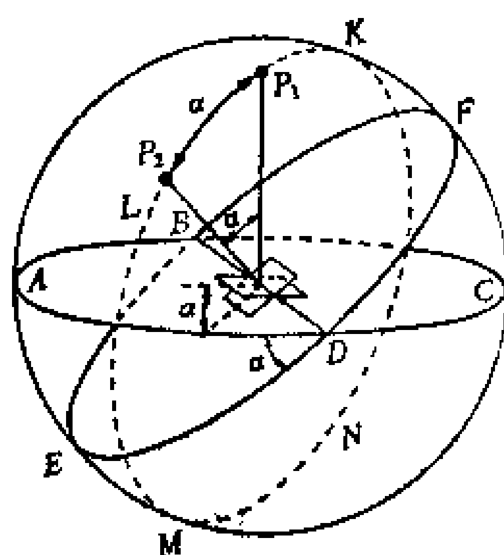


图 8-2 两个晶面之间的夹角，$ABCD$、$EBFD$ 为两晶面的面痕，P_1、P_2 为它们的极点，$LMNK$(虚线)为过 P_1 与 P_2 极点的大圆



图 8-3 经纬线网的示意图

一般情况下，要作一个半径与球面投影参考球相同的经纬线网，由图 8-3 所示. 经线是过 NS 极的大圆，它们将赤道均分成 360 份；纬线是平行于赤道的一系列小圆，它们将经线大圆等分成 360 份. 将透明的球面投影罩在经纬线网上就能够进行一系列的测量工作.

要测量球面投影上两极点(或迹点)P_1 与 P_2 之间的夹角，只要转动罩在经纬线网上的球面投影，使极点 P_1、P_2 同时落在一条经线上，读出两极点间的纬度差，就是它们之间的角度数. 如图 8-4

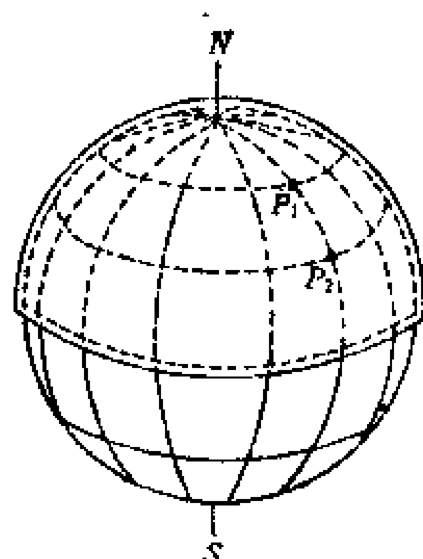


图 8-4 利用经纬线网测量球面投影上两极点 P_1、P_2 间的夹角

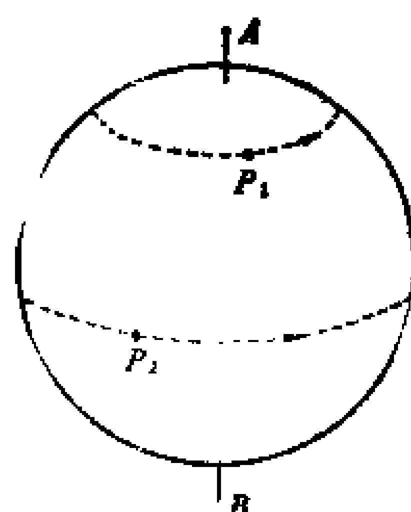


图 8-5 晶体绕 AB 轴转动时其极点的轨迹为小圆

所示.

图 8-5 给出当晶体绕球面投影的一条直径 AB 转动时，任意两极点 P_1、P_2 的轨迹. 它们是一系列小圆. 当投影的 AB 与经纬线网的 NS 轴重合时，这些轨迹分别是极点所在的纬线. 如果要求得知晶体转动某一角度后，任两极点位置的变动情况，则要求将球面投影罩在经纬线网上，让晶体转轴与经纬线网的 N-S 极重合，使各极点在其纬线上沿晶体转动的方向跨过相同的度数. 就获得了晶体转动后的极点位置. 例如图 8-6 中的极点 P_1'、P_2' 就是

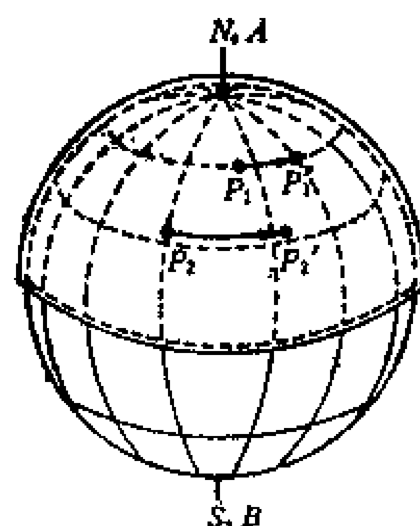


图 8-6 晶体绕某轴转动前后的极点变动，P_1、P_2 和 P_1'、P_2' 分别为晶体转动前后的极点位置

晶体绕 AB 轴反时针转 ϕ 角后极点 P_1、P_2 的位置.

球面投影，虽然将不规则几何图形中的角关系变换到了规则的球面上，但是它仍然为三维图形，笨重的球罩装置不便于使用.球面投影的重要性在于它是各种平面投影的过渡和桥梁，并且可以帮助初学者理解平面投影中的各种关系，以启发由二维图形到三维图形的想象力.

二、极 射 投 影

极射投影是将球面投影转化为平面图形的一种变换方法. 可以借助于图 8-7 说明如何进行这种变换. 图 8-7 中的参考球上有两个极点 P_1 与 P_2，参考球心为 O，欲作极射投影，先在球面上取一点 S，放上投影光源，然后垂直于直径 OS 任意放投影面. 图中给出的两个投影面一个过球心 O，记为 (I) 面，另一个与球相切于

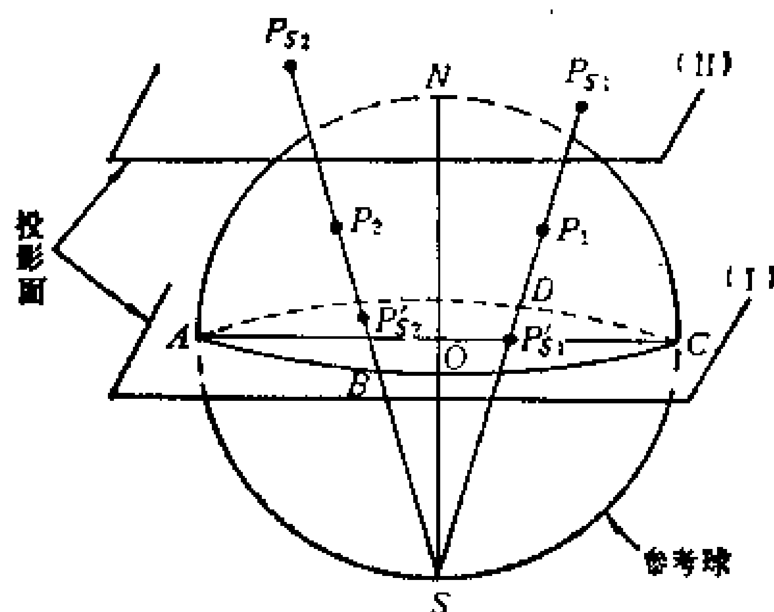
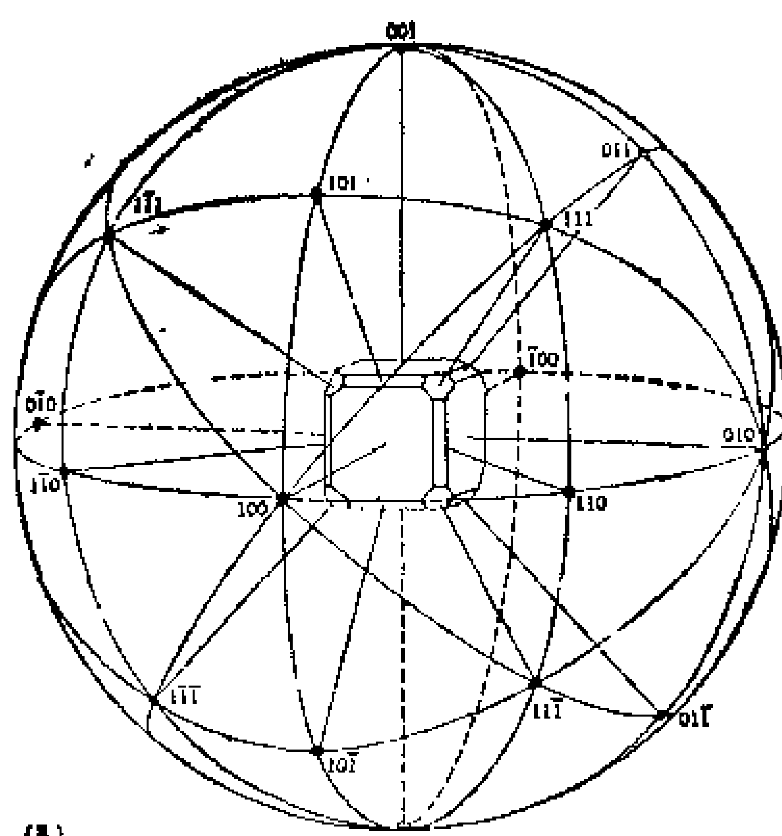


图 8-7 球面投影与极射投影，参考球心为 O，投影光源在球面上的 S 点，投影面垂直于 OS，其中 (I) 过球心，(II) 与球相切于 N. 取投影面 (I) 时极点 P_1、P_2 的投影为 P'_{S_1}、P'_{S_2}，基圆为 $ABCD$；取投影面 (II) 时 P_1，P_2 的投影点为 P_{S_1}、P_{S_2}，因图面限制未画出基圆



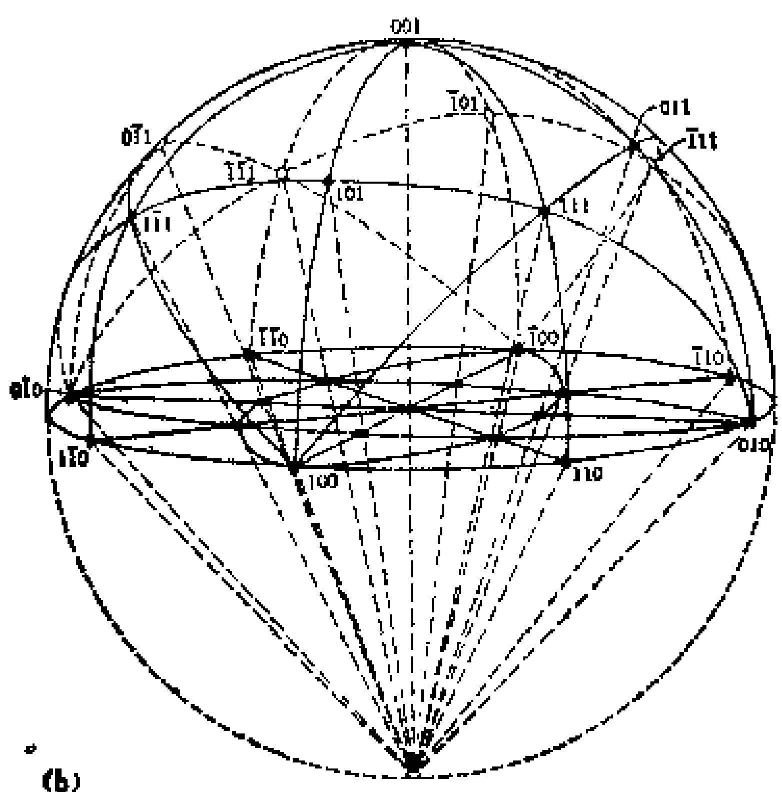


图 8-8　球面投影与极射投影之间的关系

(a) 立方晶系主要晶面的球面投影；(b) 球面投影转化为极射投影，投影面过参考球心，极射投影上的极点为虚直线与投影面的交点

N，记为(II)面．P_1、P_2 点的极射投影点就是直线 SP_1、SP_2 与投影面的交点，对投影面(I)为 P'_{S1} 与 P'_{S2}，对投影面(II)为 P_{S1} 与 P_{S2}．可以把参考球想象成不透光的黑球，只在极点 P_1 与 P_2 处有两个透光洞，因此只有两条由光源 S 发出的光能照到投影面上．同时，投影面上必须留下与 OS 相垂直的大圆（$ABCD$）的投影，称其为极射投影的基圆．自然，对投影面（I），基圆就是 $ABCD$ 本身，对投影面（II），它将是 $ABCD$ 上各点与 S 相连的直线与面（II）的交线，图 8-7 中并未给出．同时应逆着投影光源去观察极射投影．

图 8-8 给出了立方晶系中主要晶面的球面投影 (a) 与极射投影 (b)．图 8-8 (b) 中的投影面过参考球心．由虚线表示的直线为投影"光线"，极射投影上的极点就是这些虚直线与投影面的交点．从图 8-8 (b) 可以看出，当投影光源放在$(00\bar{1})$极点处时，只有在上半球面上的极点的投影才在基圆内，而下半球面上的极点的投影必然在基圆外． 不过，可以分别把投影光源放在$(00\bar{1})$和(001)处作两次投影，从而在投影面的两侧分别记录了上半球与下半球面上的极点，两部分投影的极点用不同的记号标记．这样，就可以在基圆内表达整个球面上的极点了．

球面投影上极点或迹点的极射投影分别称为极射投影中的极

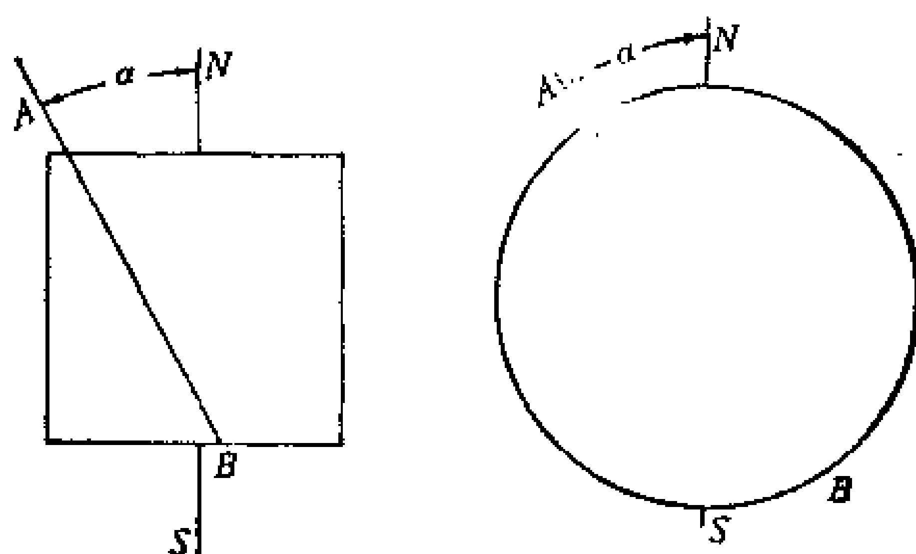


图 8-9　面痕的极射投影

(a) 试样表面上的痕迹 AB；(b) AB 在极射投影上的表示

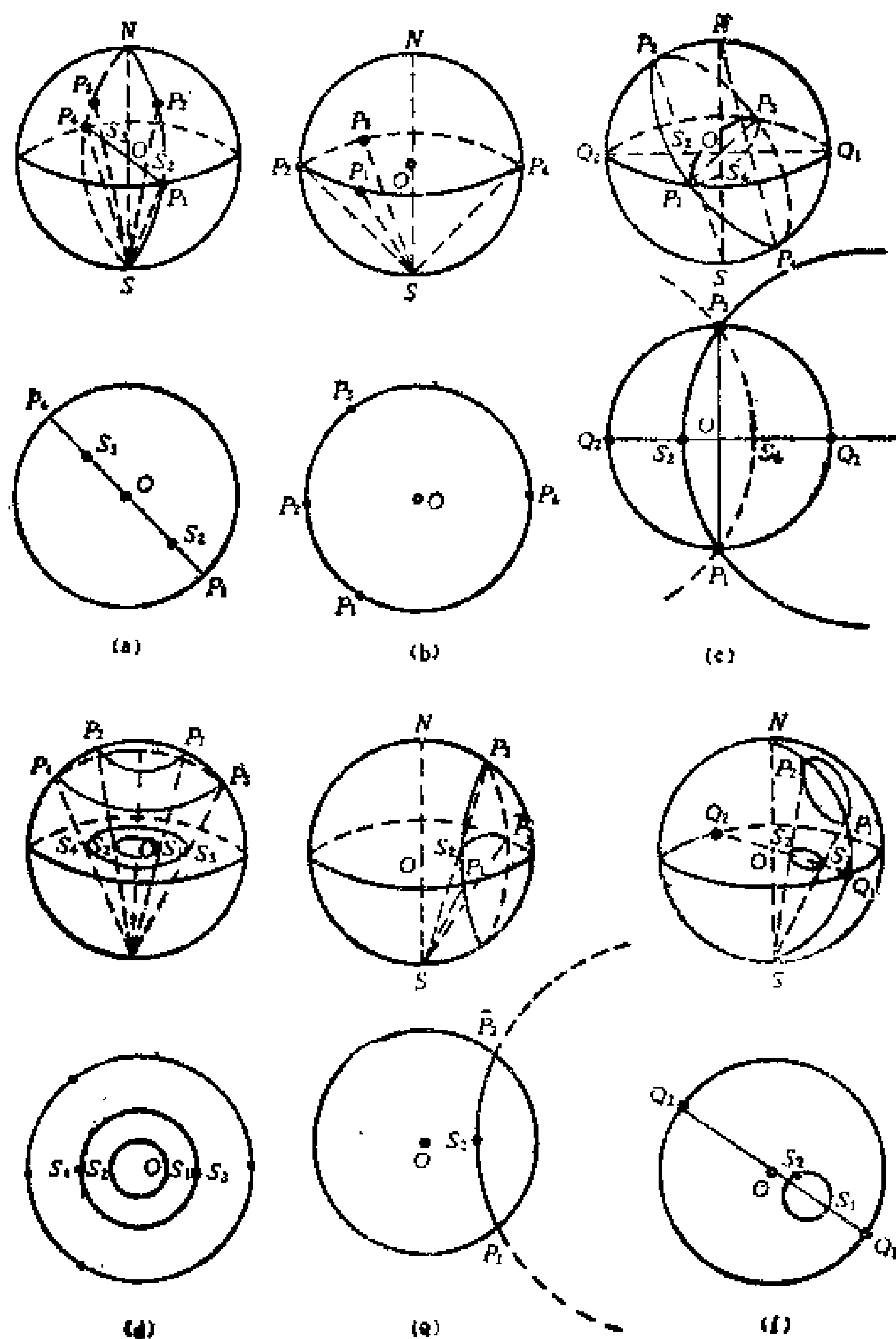


图 8-10　球面上的大、小圆的极射投影

(a)、(b)、(c)为大圆的极射投影；(d)、(e)、(f) 为小圆的极射投影

点或迹点.

试样表面上的痕迹,图 8-9(a) 中的 *AB* 线,如滑移线,孪生,沉积物等,当试样表面与投影面平行时,它为极射投影的一条直径与基圆的交点,即图 8-9(b) 中的 *A*、*B* 点.

图 8-10 利用图解的方法说明当球面投影上的大圆和小圆相对投影面有不同取向时的极射投影图形. 与投影面垂直的大圆的极射投影为过基圆中心的一条直线,如图 8-10(a) 所示;与投影面平行的大圆的极射投影为投影的基圆,如图 8-10(b) 所示;与投影面成一定倾度的大圆, 投影成极射投影上的一条经线, 如图 8-10 (c) 所示. 图 8-10 (d),(e) 和 (f) 分别表示球面上的小圆与投影面平行、垂直和倾斜时的情况, 它们分别形成极射投影上的同心圆,纬线和任意小圆,但是图 8-10(f) 中极射投影上的小圆中心不再是球面投影上的小圆中心. 总之, 球面上的大圆极射投影后仍为大圆,球面上的小圆投影后仍为小圆.

三、吴氏网与极网

前面谈到,要用球面投影解晶体学问题,应使它与球面经纬线网相配合;同样,要用极射投影解晶体学问题, 必须有与其配合使用的面网——吴氏网和极网.

图 8-11 和图 8-12 分别给出了吴氏网和极网. 它们都是球面经纬线网的极射投影图. 如果把投影光源放在赤道上, 按极射投影的规则去作,就获得吴氏网;如果把投影光源放在球面经纬线网的南北极,就获得极网. 球面经纬线网上的经、纬线投影后仍称为经纬线. 吴氏网上的经线是南一北极走向,纬线是东一西走向;极网上的经线是辐射状,纬线为同心圆.

下面介绍吴氏网和极网的基本用法. 为了清楚起见, 规定以字母 N、S、W、E 分别表示极射投影图的北、南、西、东.

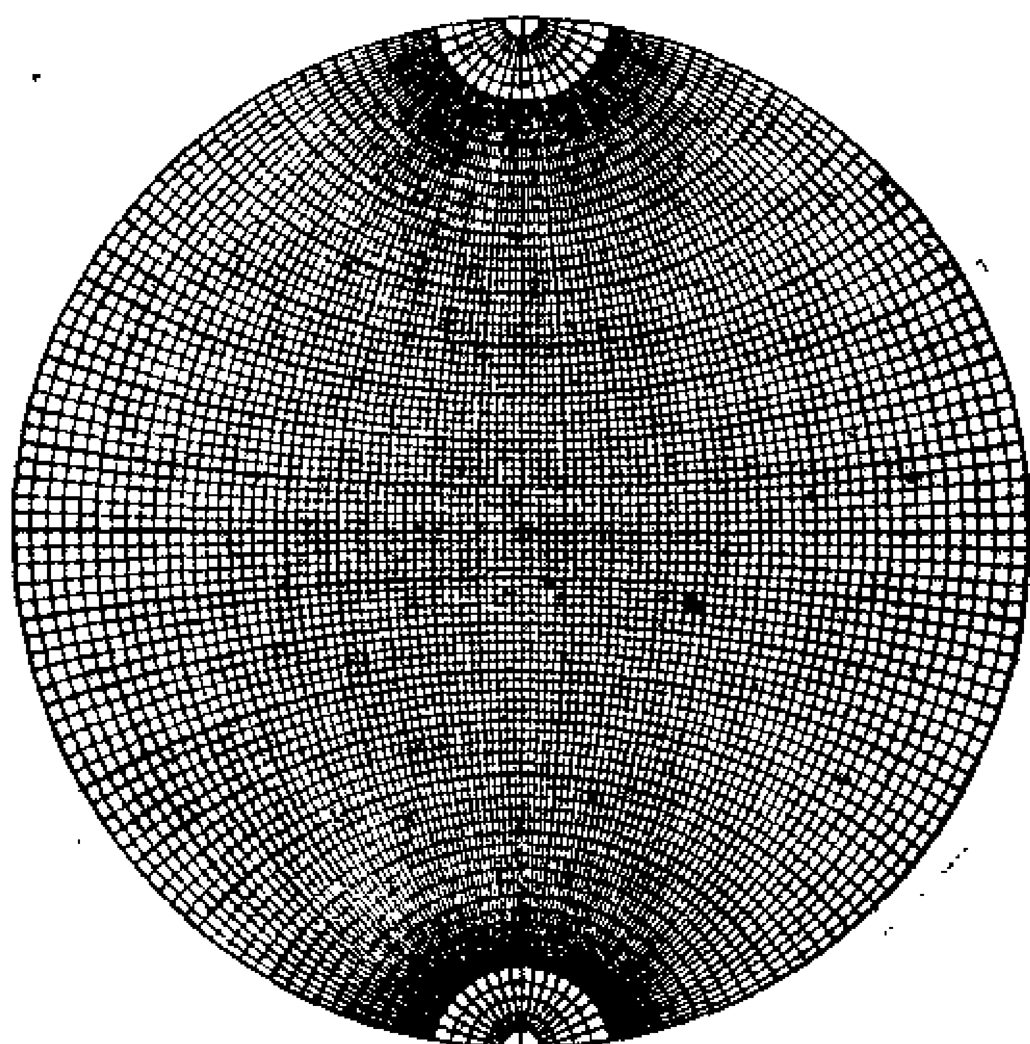


图 8-11　吴氏网

图 8-13 所示的极射投影上有 P_1、P_2 两个极点．现在介绍如何利用吴氏网测量这两个晶面之间的夹角．为此，首先将极射投影图绘在描图纸上，让它与半径相同的吴氏网重合，并将它们的中心钉在一起；转动投影，使欲测的两个极点落在同一条经线上，如图 8-13(b) 所示，读出两极点间的纬度差，就是它们之间的夹角度数．图 8-13 所示的两极点 P_1、P_2 之间相距 30° 角．

图 8-14 中给出晶体的两个极点 A_1 和 B_1，要了解晶体绕 NS 轴反时针转 60°后的位置，为此，将投影的 NS 轴与吴氏网的南北极重合，然后让极点 A_1、B_1 沿各自所在的纬线反时针转 60°，就获得了晶体转动后相应的极点位置 A_2 与 B_1'．由于 A_1，A_2 和 B_1 都

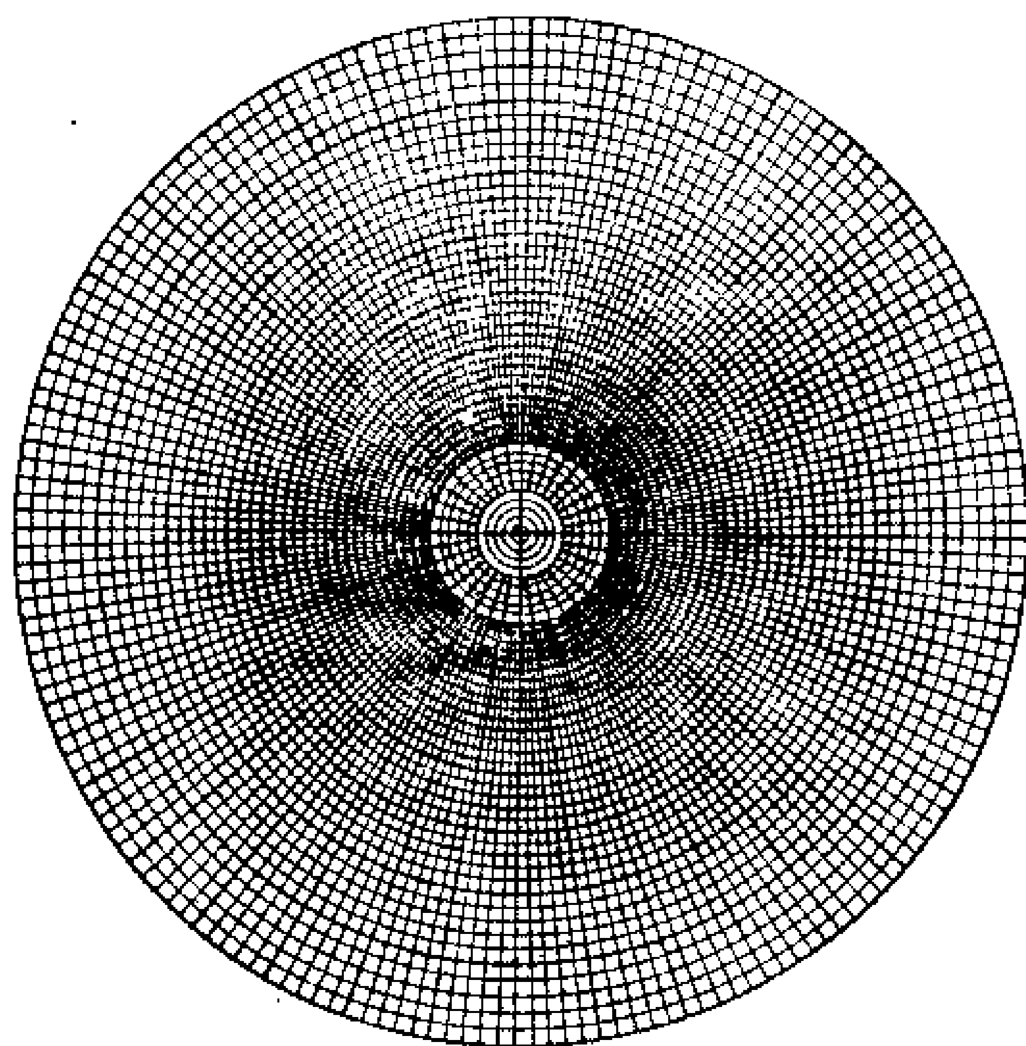
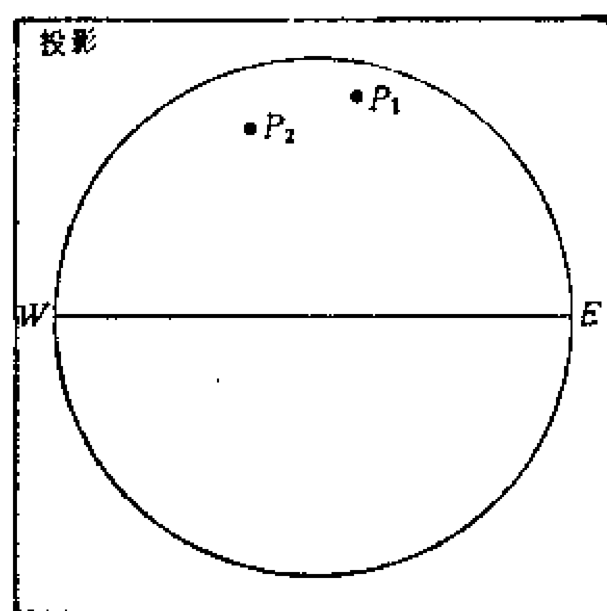


图 8-12 极网

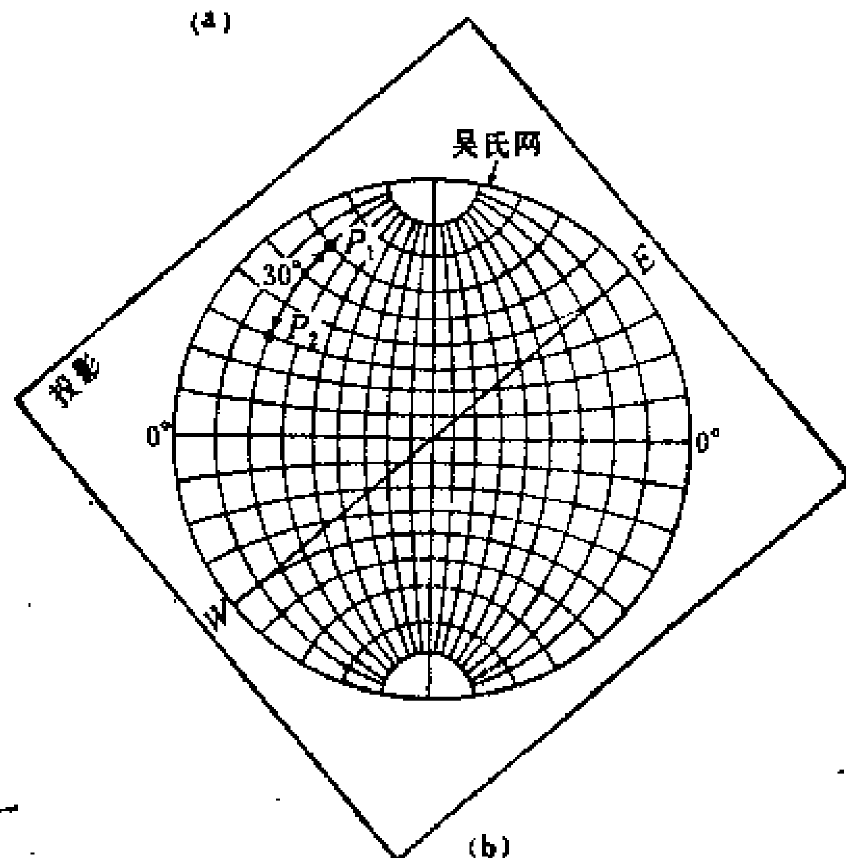
在投影的正面，极点以“⊕”标记；B_1' 在投影的背面，因此以“⊖”标记．而 B_1' 的反方向 B_2 在投影的正面．

当晶体绕投影面法线转动时，极点的轨迹在一个个同心圆上，图 8-15 给出晶体绕投影面法向反时针转动 50° 前后的极点 P_1，P_2，P_3 和 P_1'、P_2'、P_3'．

下面讨论如何利用吴氏网完成晶体绕与投影面有一定倾度的轴的转动．为此，首先把转动分解成两个分转动，即一个绕投影面法线的转动和一个绕基圆直径的转动．这一情况让我们以图8-16(a)中极点 A_1 绕极点 B_1 的转动为例加以说明．首先将投影蒙在吴氏网上，让转轴 B_1 落在赤道上，再让 B_1 转到投影中心成 B_2，



(a)



(b)

图 8-13　两极点之间的角度测量

(a) 极射投影上的两极点 P_1 与 P_2；(b) P_1 与 P_2 之间夹角的测量

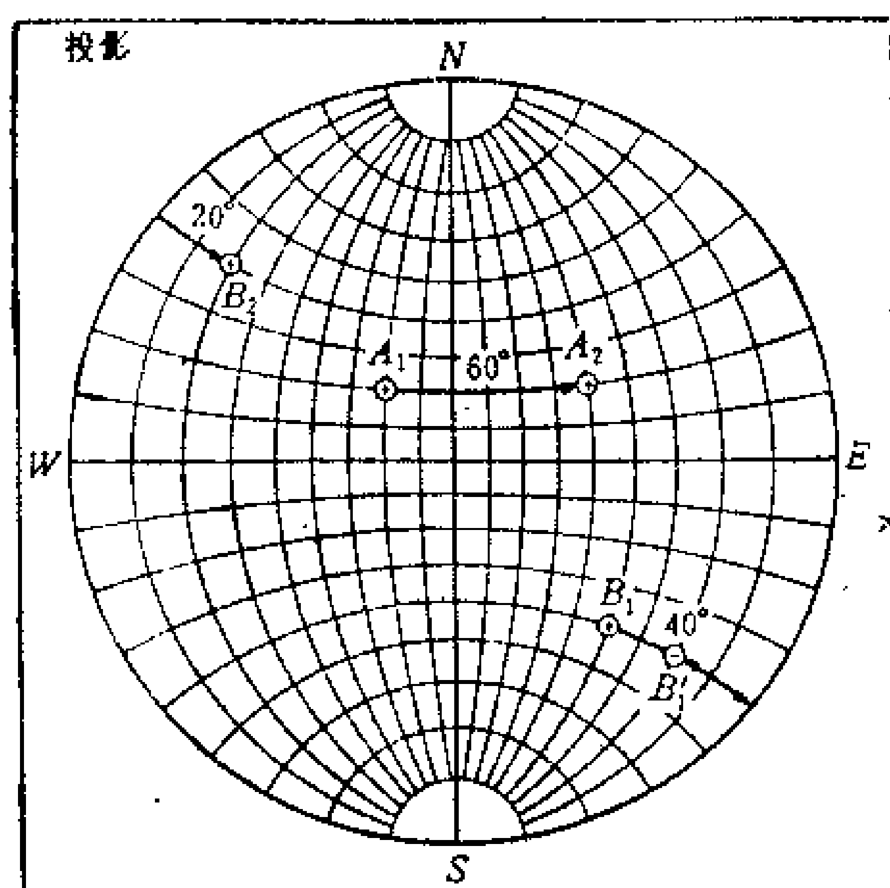


图 8-14　晶体绕 NS 轴转动前后的极点位置 A_1、B_1 与 A_2、B_2，"⊕"代表极点在投影的正面，"⊖"代表极点在投影的背面。B_1'与 B_1 为同一晶面的两个极点

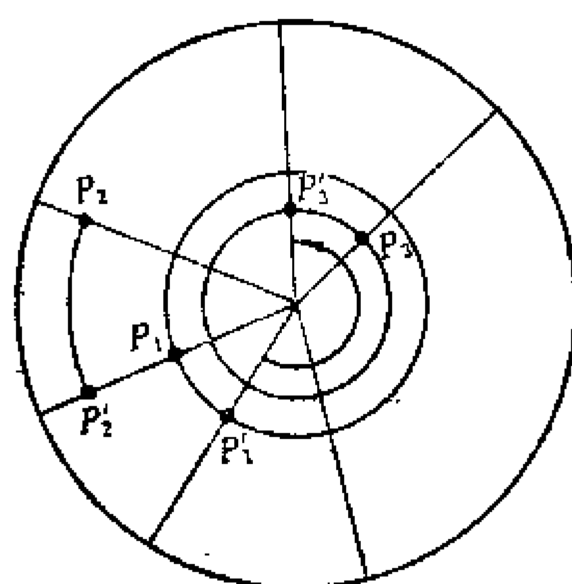
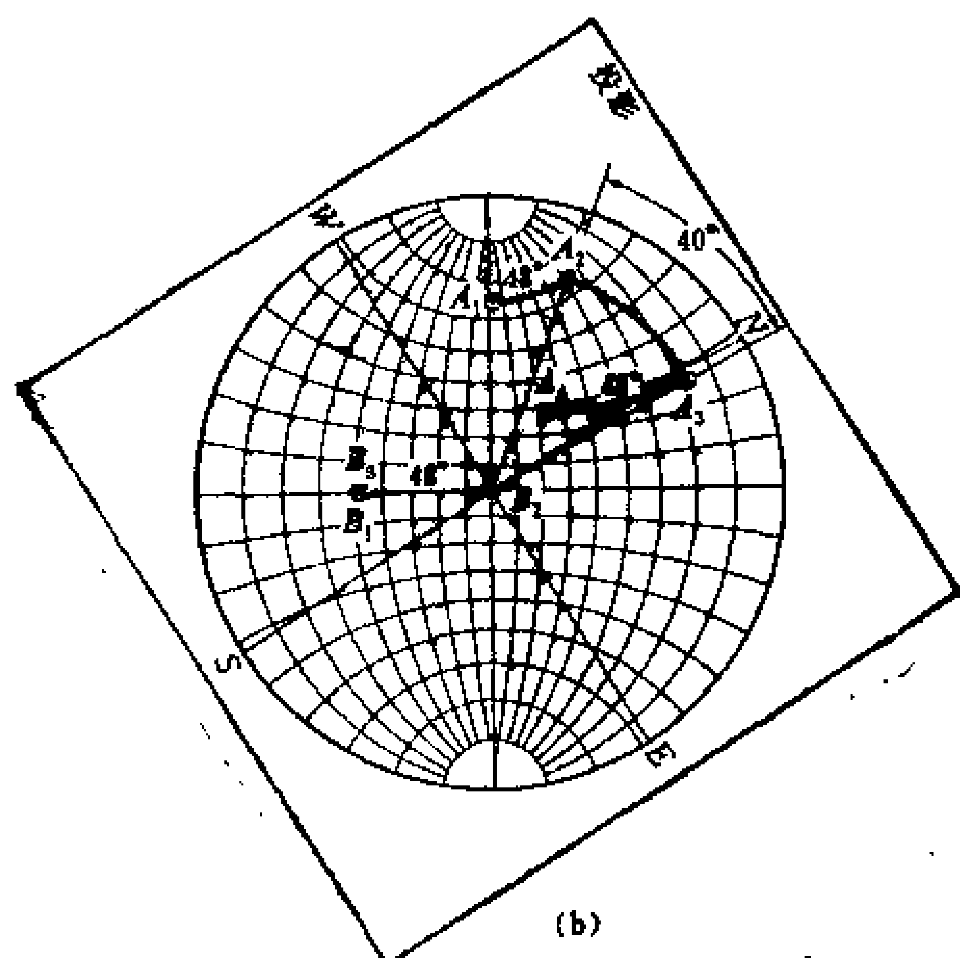
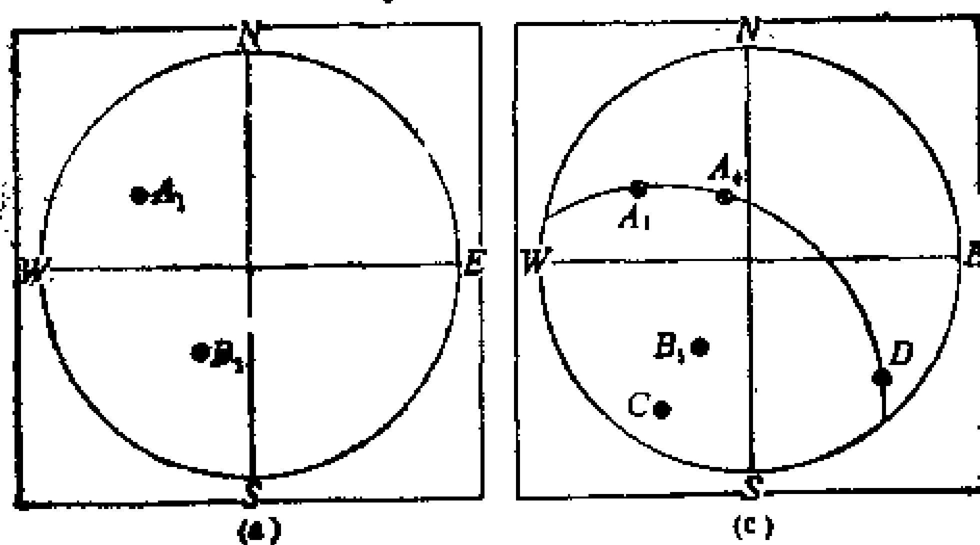


图 8-15　晶体绕投影面法线转动前后的极点位置 P_1、P_2、P_3 与 P_1'、P_2'、P_3'



(b)



(a)　　　　(c)

图 8-16　晶体绕倾斜轴转动时的极点运动

(a) 转轴 B_1 与极点 A_1 的位置；(b)转动过程；(c)转动结果

A_1也沿其所在纬线同方向转动相同的度数达到A_2，图 8-16(b)中所示的情况为反时针转动 48°. 这时，晶体可以绕 B_2 转动所要求的度数，例如顺时针转 40°，极点 A_2 达到 A_3 位置. 为了使转轴的初始位置复原，再让 B_2 反转到 B_1 的位置，记为 B_3，同时 A_3 相应地转到 A_4 位置. 图 18-16(c) 表示了极点 A_1 绕 B_1 轴顺时针转 40°的结果，即 A_1 绕轴 B_1 转动时，A_1 是沿小圆 A_1、A_4、D 在运动，小圆上各点与 B_1 成等角度，但小圆的几何中心不是 B_1 而是 C。

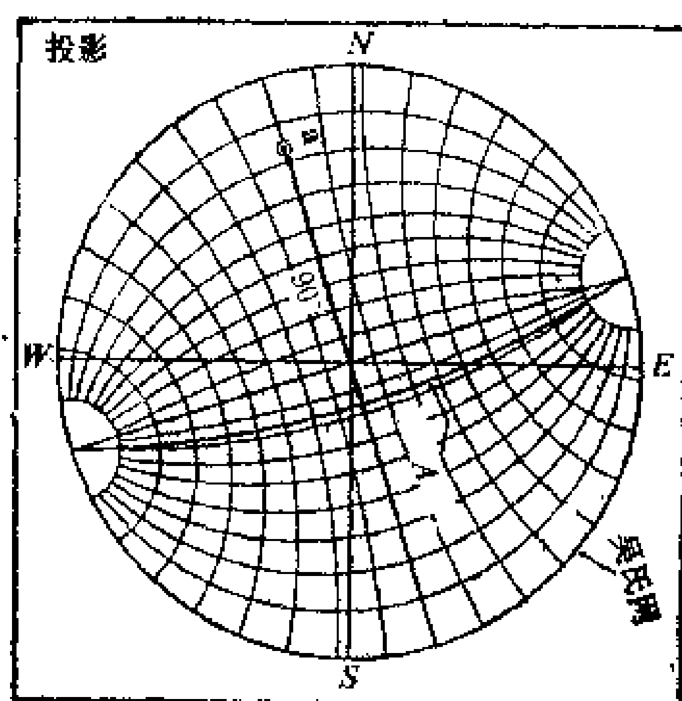


图 8-17 同一晶面的极点 a 与面痕 A 之间关系的极射投影表示，晶带轴与晶带之间也存在此种关系

同一晶面的极点 a 与它的面痕 A 之间存在如图 8-17 所示的关系. 即极点与面痕之间处处呈 90°，或者说，面痕是距极点 90° 的一条经线. 晶带与晶带轴之间也存在图 8-17 所示的关系. 如果 a 为带轴 [$u\ v\ w$] 的迹点，则凡属此晶带的晶面，它们的极点必然落在大圆 A 上，此时称 A 为晶带大圆.

为了引起初学者的注意，现将上述吴氏网的基本用法强调如下：

1. 利用吴氏网测量极射投影上两极点之间的角度时，必须先将两极点转到吴氏网的同一条经线上，再读出它们之间的纬度差，就是它们之间的夹角度数，如图 8-13 所示.

2. 晶体绕任一轴转动时，转动前后各极点之间的关系应不改变. 因此，当晶体转动时，极点的转动应按一定的规则进行：

①当晶体绕基圆直径转动时，转轴应与吴氏网的南、北极重合，并让各个极点都沿自己所在的纬线同向转动相同的度数，如图 8-14 所示.

②当晶体绕投影面的法线转动时，转轴应与极网的中心重合，并让各个极点都沿自己所在的纬线同向转动相同的度数，如图 8-15 所示.

③当晶体绕倾斜轴转动时，应把它分解成一个绕基圆直径的转动，一个绕投影面法线的转动，如图 8-16 所示.

3. 同一晶面的极点和面痕之间的关系如图 8-17 所示，即面痕为与极点相距 90° 的一条经线. 晶带大圆与带轴迹点之间也存在同样的关系.

四、标准投影

标准投影是以低指数的晶面平行于投影面时，晶体中主要晶面或晶向的投影. 以平行投影面的晶面或垂直投影面的方向定名标准投影，也就是以基圆中心的极点或迹点指数定名标准投影，例如图 8-18 为立方系的 001 标准投影，图 8-19 为轴比 $c/a=1.86$ 的六方晶系的(0001)标准投影. 对于立方晶系，由于它们的晶面与晶面法线同名，所以晶面与晶向的标准投影相同，因此在标准投影名称上不以特定的括号表示. 而对于六方晶系和其他非立方晶

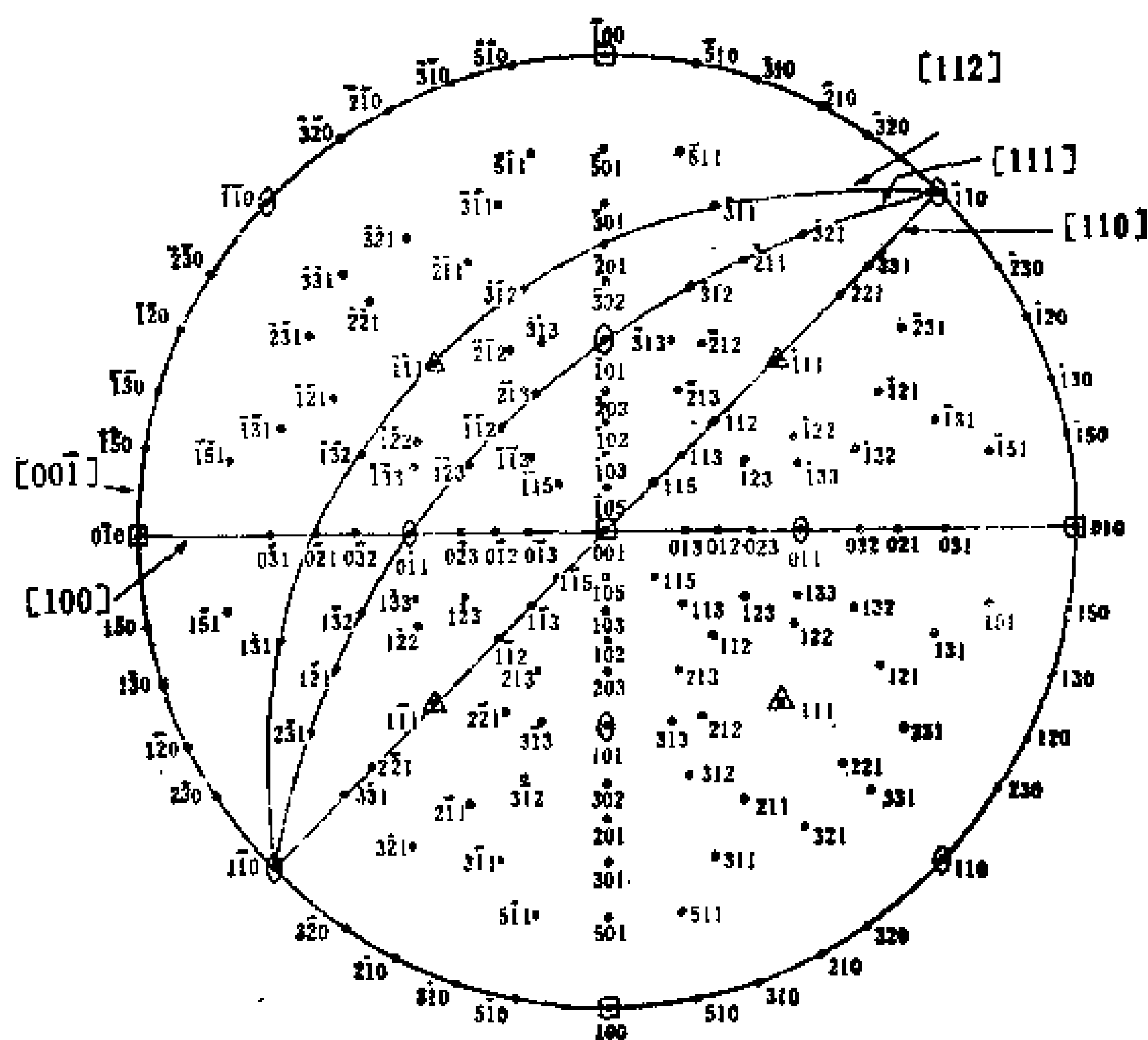


图 8-18　立方晶系的 001 标准投影

系，晶面和晶向的标准投影不同，图 8-19 表示的是某六方晶系的晶面的标准投影．一般情况下，标准投影上所包含的最高指数为 7.

在给定晶体轴比或阵胞尺寸后，就可以利用第九章中的公式计算出各个晶面之间的夹角，然后借助于吴氏网绘制出所需要的标准投影．利用晶体对称性和晶带方程可以简化绘制标准投影的过程．

表 8-1 给出立方晶系中各主要晶面之间的夹角．现以立方晶系的 001 标准投影为例，扼要说明其绘制过程．001 标准投影，自然 001 极点在基圆中心，根据立方晶系中各｛100｝极点之间的关

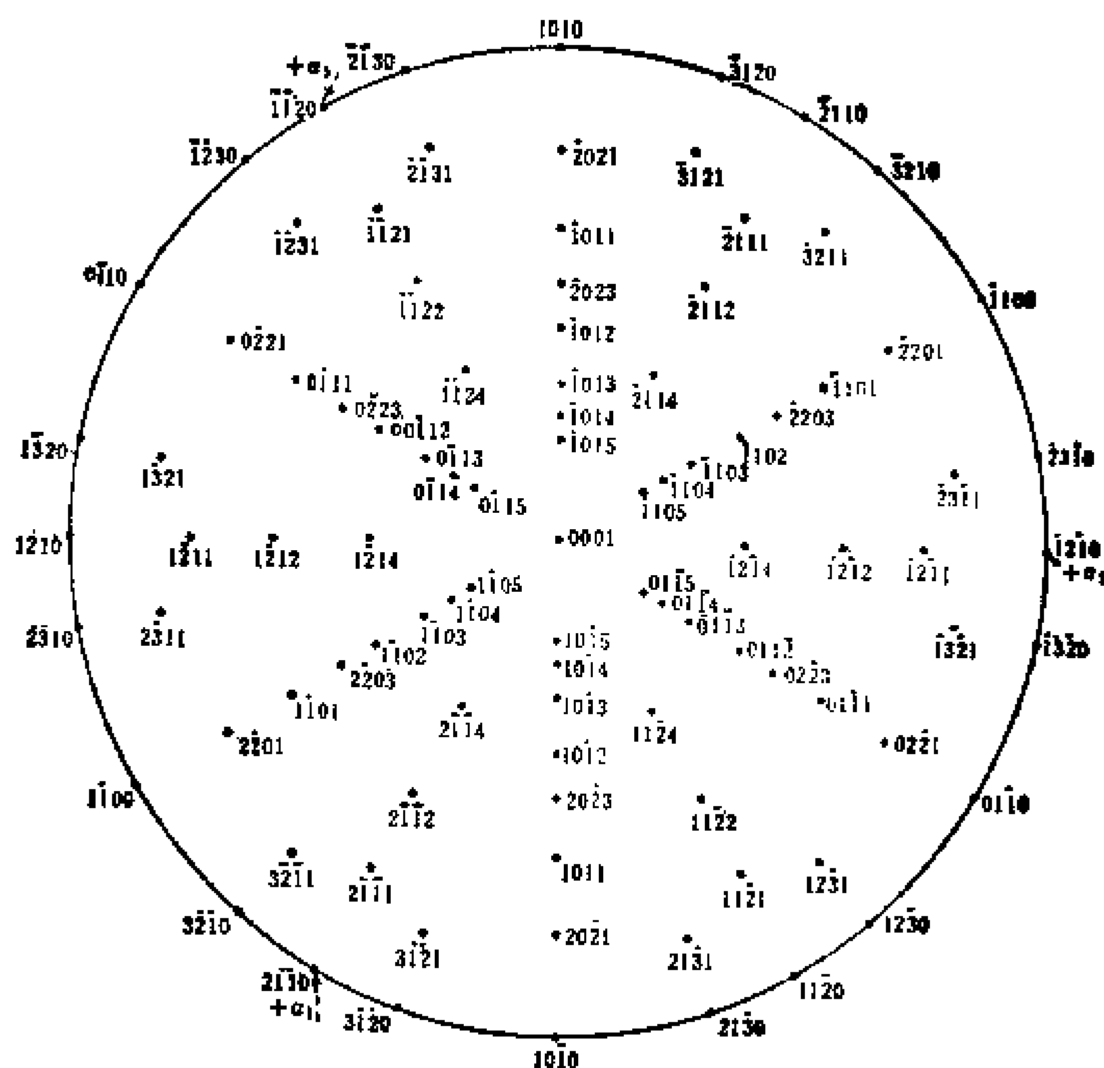


图 8-19 六方晶系的(0001)标准投影，轴比 $c/a=1.86$

系，即相互之间呈 90°，可以方便地把它们放在标准投影上，如图 8-20所示。利用立方晶系中晶面与晶向同名的特点，可以在图中绘出各⟨100⟩晶带的晶带大圆。利用晶带方程：

$$hu+kv+lw=0$$

即当晶带轴为 $[u\ v\ w]$ 时，凡属该晶带的晶面 $(h\ k\ l)$ 都满足此方程。所以如果 $(h_1\ k_1\ l_1)$ 与 $(h_2\ k_2\ l_2)$ 晶面属于 $[u\ v\ w]$ 晶带，则 $(h_1+h_2\ \ k_1+k_2\ \ l_1+l_2)$ 晶面也属于 $[u\ v\ w]$ 晶带。于是在⟨100⟩晶带大圆上，任意两{100}极点之间都存在一个{110}极点。并且可以由特定的{100}指数确定特定的{110}指数，例如在(100)与(010)极点之间存在一个(110)极点。 {110}极点的具体位置则由

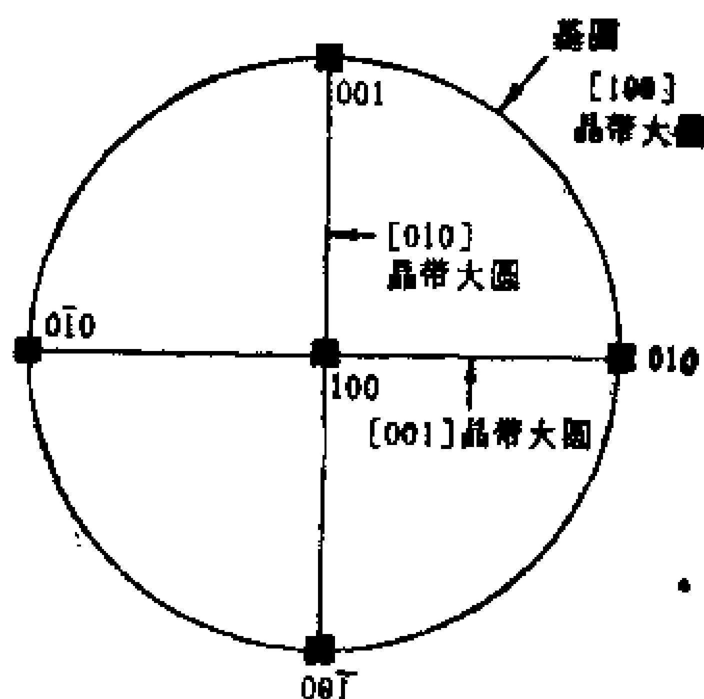


图 8-20　立方晶系中 001 标准投影中的{100}极点及<100>晶带大圆

表 8-1　立方晶系中各主要晶面之间的夹角

hkl	hkl	角度			
100	100	0.00	90.00		
	110	45.00	90.00		
	111	54.74			
	210	26.56	63.43	90.00	
	211	35.26	65.90		
	221	48.19	70.53		
	310	18.43	71.56	90.00	
	311	25.24	72.45		
	320	33.69	56.31	90.00	
	321	36.70	57.69	74.50	
	322	43.31	60.98		
	331	46.51	76.74		
	332	50.24	64.76		
	410	14.04	75.96	90.00	
	411	19.47	76.37		
110	110	0.00	60.00	90.00	
	111	35.26	90.00		
	210	18.43	50.77	71.56	
	211	30.00	54.74	73.22	90.00
	221	19.47	45.00	76.37	90.00
	310	26.56	47.87	63.43	77.08
	311	31.48	64.76	90.00	

续表 8-1

hkl	*hkl*	角度								
	320	11.31	53.96	66.91	78.69					
	321	19.11	40.89	55.46	67.79	79.11				
	322	30.96	46.69	80.12	90.00					
	331	13.26	49.54	71.07	90.00					
	332	25.24	41.08	81.33	90.00					
	410	30.96	46.69	59.04	80.12					
	411	33.56	60.00	70.53	90.00					
111	111	0.00	70.53							
	210	39.23	75.04							
	211	19.47	61.87	90.00						
	221	15.79	54.74	78.90						
	310	43.09	68.58							
	311	29.50	58.52	79.98						
	320	36.81	80.78							
	321	22.21	51.89	72.02	90.00					
	322	11.42	65.16	81.95						
	331	22.00	48.53	82.39						
	332	10.02	60.50	75.75						
	410	45.56	65.16							
	411	35.26	57.02	74.21						
210	210	0.00	36.87	53.13	66.42	78.46	90.00			
	211	24.09	43.09	56.79	79.48	90.00				
	221	26.56	41.81	53.40	63.43	72.65	90.00			
	310	8.13	31.95	45.00	64.90	73.57	81.87			
	311	19.29	47.61	66.14	82.25					
	320	7.12	29.74	41.91	60.25	68.15	75.64	82.87		
	321	17.02	33.21	53.30	61.44	68.99	83.14	90.00		
	322	29.80	40.60	49.40	64.29	77.47	83.77			
	331	22.57	44.10	59.11	72.07	84.11				
	332	30.89	40.29	48.13	67.58	73.38	84.53			
	410	12.53	29.80	40.60	49.40	64.29	77.47	83.77		
	411	18.43	42.45	50.77	71.56	77.83	83.95			
211	211	0.00	33.56	48.19	60.00	70.53	80.40			
	221	17.72	35.26	47.12	65.90	74.21	82.18			
	310	25.35	49.80	58.91	75.04	82.58				
	311	10.02	42.39	60.50	75.75	90.00				
	320	25.06	37.57	55.52	63.07	83.50				
	321	10.89	29.20	40.20	49.11	56.94	70.89	77.40	83.74	90.00
	322	8.05	26.98	53.55	60.32	72.72	78.58	84.32		
	331	20.51	41.47	68.00	79.20					
	332	16.78	29.50	52.46	64.20	69.62	79.98	85.01		
	410	26.98	46.12	53.55	60.32	72.72	78.58			
	411	15.79	39.66	47.66	54.74	61.24	73.22	84.48		

hkl	*hkl*	角度							
221	221	0.00	27.27	38.94	63.61	83.62	90.00		
	310	32.51	42.45	58.19	65.06	83.95			
	311	25.24	45.29	59.83	72.45	84.23			
	320	22.41	42.30	49.67	68.30	79.34	84.70		
	321	11.49	27.02	36.70	57.69	63.55	74.50	79.74	84.89
	322	14.04	27.21	49.70	66.16	71.13	75.96	90.00	
	331	6.21	32.73	57.64	67.52	85.61			
	332	5.77	22.50	44.71	60.17	69.19	81.83	85.92	
	410	36.06	43.31	55.53	60.98	80.69			
	411	30.20	45.00	51.06	56.63	66.87	71.68	90.00	
310	310	0.00	25.84	36.87	53.13	72.54	84.26		
	311	17.55	40.29	55.10	67.58	79.01	90.00		
	320	15.26	37.87	52.12	58.25	74.74	79.90		
	321	21.62	32.31	40.48	47.46	53.73	59.53	65.00	75.31
		85.15	90.00						
	322	32.47	46.35	52.15	57.53	72.13	76.70		
	331	29.47	43.49	54.52	64.20	90.00			
	332	36.00	42.13	52.64	61.84	66.14	78.33		
	410	4.40	23.02	32.47	57.53	72.13	76.70	85.60	
	411	14.31	34.93	58.55	72.65	81.43	85.72		
311	311	0.00	35.10	50.48	62.96	84.78			
	320	23.09	41.18	54.17	65.28	75.47	85.20		
	321	14.76	36.31	49.86	61.09	71.20	80.72		
	322	18.07	36.45	48.84	59.21	68.55	85.81		
	331	25.94	40.46	51.50	61.04	69.76	78.02		
	332	25.85	39.52	50.00	59.05	67.31	75.10	90.00	
	410	18.07	36.45	59.21	68.55	77.33	85.81		
	411	5.77	31.48	44.71	55.35	64.76	81.83	90.00	
320	320	0.00	22.62	46.19	62.51	67.38	72.08		
	321	15.50	27.19	35.38	48.15	53.63	58.74	68.24	72.75
		77.15	85.75	90.00		68.24	72.75		
	322	29.02	36.18	47.73	70.35	82.27	90.00		
	331	17.36	45.58	55.06	63.55	79.00			
	332	27.50	39.76	44.80	72.80	79.78	90.00		
	410	19.65	36.18	42.27	47.73	57.44	70.35	78.36	82.27
	411	23.76	44.02	49.18	70.92	86.25			
321	321	0.00	21.79	31.00	38.21	44.41	49.99	64.62	69.07
		73.40	85.90						
	322	13.51	24.84	32.57	44.52	49.59	63.01	71.09	78.79
		82.55	86.28						
	331	11.19	30.85	42.63	52.18	60.63	68.42	75.80	82.96
		90.00							
	332	14.38	24.26	31.27	42.20	55.26	50.15	62.88	73.45
		80.16	83.46	86.73					
	410	24.84	32.57	44.52	49.59	54.31	63.01	67.11	71.09
		82.55	86.28						
	411	19.10	36.02	40.89	46.14	50.95	55.46	67.79	71.64
		75.40	79.11	86.39					

hkl	hkl	角度						
322	322	0.00	19.75	58.03	61.93	76.39	86.63	
	331	18.93	33.42	43.67	59.95	73.85	80.97	86.81
	332	10.74	21.45	55.33	68.78	71.92	87.04	
	410	34.57	49.68	53.97	69.33	72.90		
	411	23.84	42.00	46.69	59.04	62.79	66.41	80.12
331	331	0.00	26.52	37.86	61.73	80.91	86.98	
	332	11.98	28.31	38.50	54.06	72.93	84.39	90.00
	410	33.42	43.67	52.26	59.95	67.08	86.81	
	411	30.09	40.80	57.27	64.37	77.51	83.79	
332	332	0.00	17.34	50.48	65.85	79.52	82.16	
	410	39.14	43.62	55.33	58.86	62.26	75.02	
	411	31.32	45.29	49.21	55.75	66.30	69.40	84.23
410	410	0.00	19.75	28.07	61.93	76.39	86.63	90.00
	411	13.63	30.96	62.78	73.39	80.12	90.00	
411	411	0.00	27.27	38.94	60.00	67.12	86.82	

表 8-1 中的角度数确定．图 8-21 中以对称图形表示了{110}各极点的位置，并且给出了各个〈110〉晶带大圆．同样，{111}极点应在

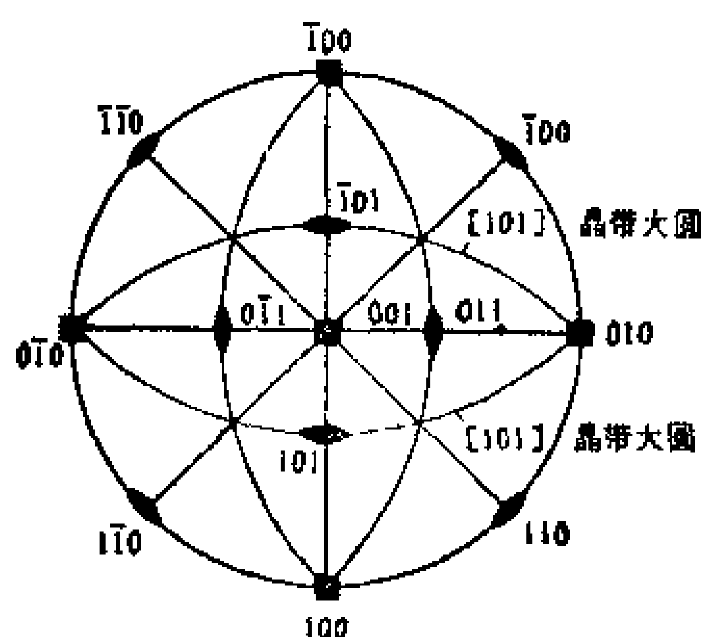


图 8-21　001 标准投影中的{110}极点与〈110〉晶带大圆

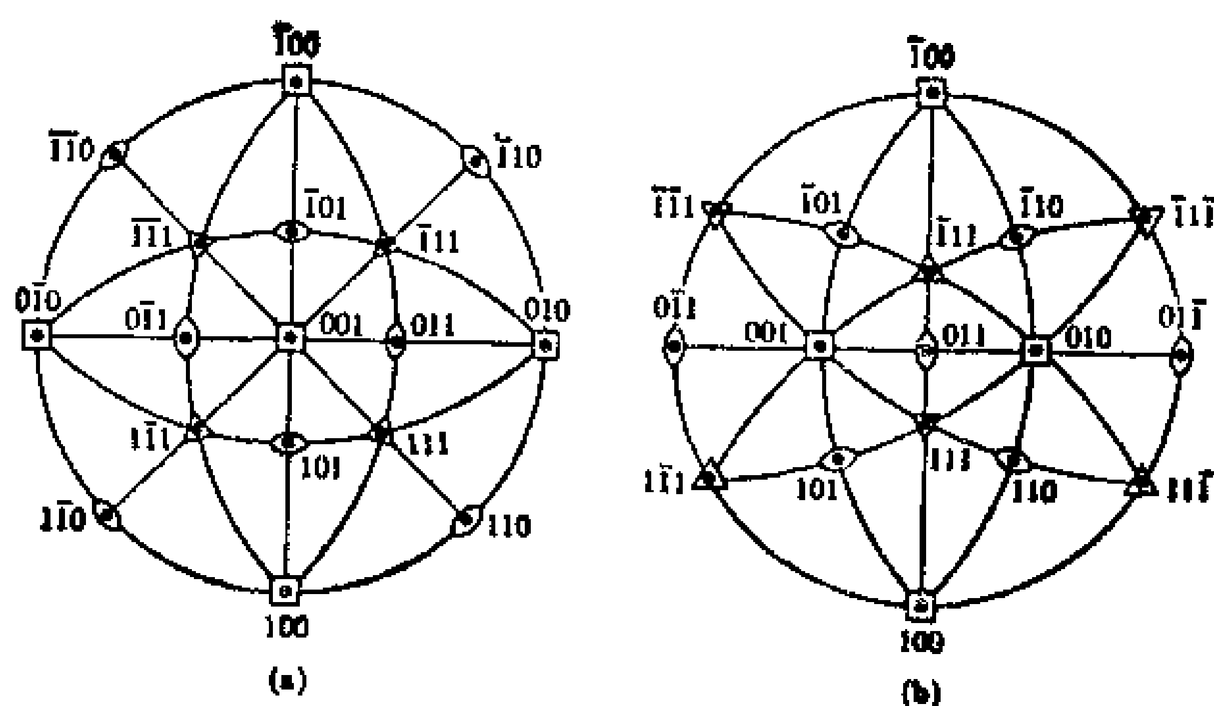


图 8-22 立方晶系的标准投影

(a) 001 标准投影；(b) 011 标准投影

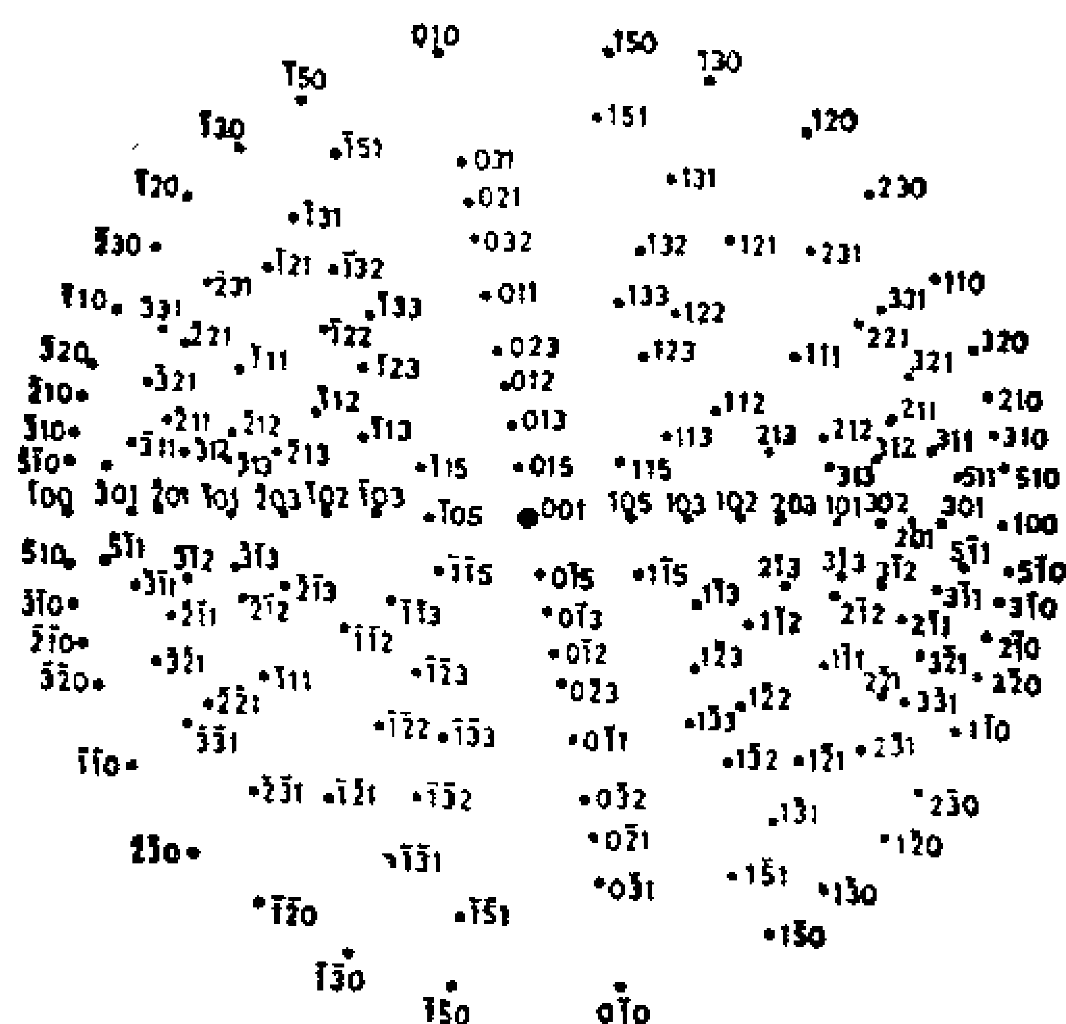


图 8-23 计算机自动绘制的 α-Pu 的(001)标准投影

{100}与{110}极点所在的晶带大圆上，这就是图 8-22(a) 中的三次轴位置．以类似的方法可以求出{112}、{113}……等其他一系列极点位置．图 8-22 给出仅包含{100}、{110}、{111} 极点的 001 和 011 标准投影．001 标准投影以 $\bar{1}00$ 为轴顺时针转 45° 就获得 011 标准投影．

目前已有各式的计算机程序，自动地计算各晶面间的夹角，并绘制出标准投影．1985 年潘金生[注]发表了基于心射投影和旋转倒易坐标系的多用程序，构思巧妙．图 8-23 是利用该程序绘制的 α-Pu 的(001)标准投影．

五、心 射 投 影

心射投影是把晶体的球面投影变换成平面图形的另一种方

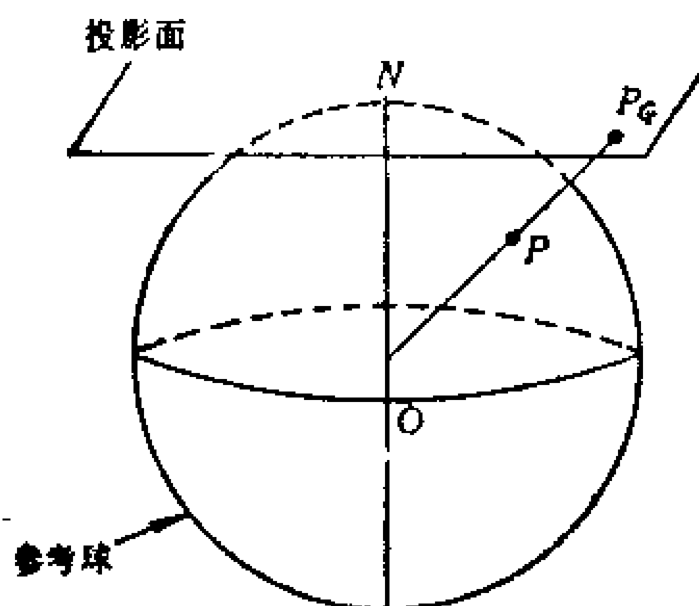


图 8-24　心射投影的获得，P 为球面投影上的极点(或迹点)，心射投影 P_G 为球心 O 和 P 连线与投影面的交点，投影面与参考球相切于 N

注：金属学报 Vol. 21, No5, (1985)

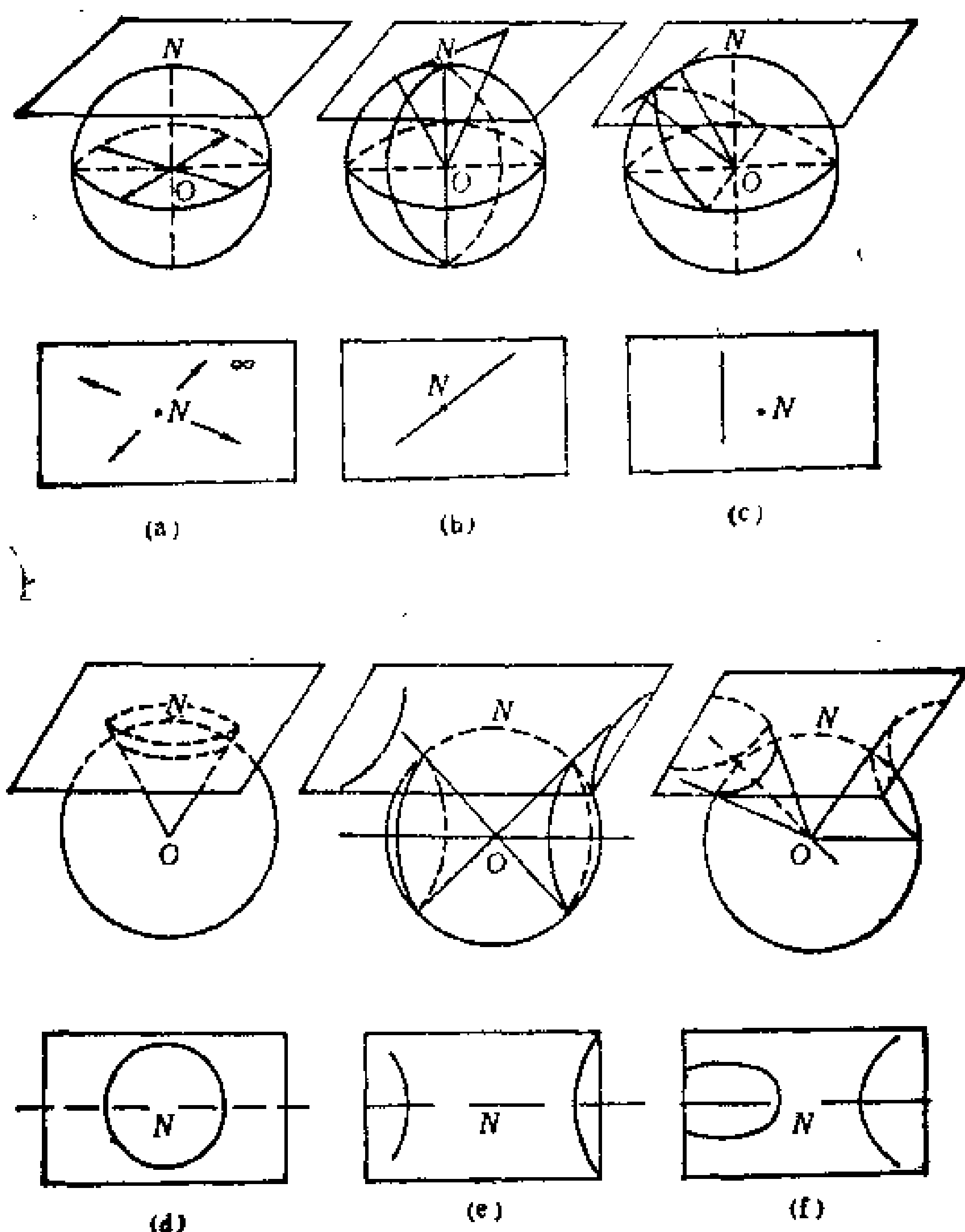


图 8-25 大圆和小圆的心射投影

(a)、(b)、(c) 分别为几种大圆的心射投影与投影图；(d)、(e)、(f) 分别为几种小圆的心射投影与投影图

式．它的作法是将投影光源放在参考球心，投影面与参考球相切．图 8-24 中参考球与投影面相切于N点，投影光源与晶体都在球心O处．极点(或迹点)P的心射投影就是OP连线与投影面的交点P_G．平行于投影面的大圆和球心的连线与投影面相交于无穷远

处，如图 8-25(a) 所示，其他大圆的心射投影都是直线，如图 8-25(b)和(c)所示. 小圆的心射投影是二次曲线. 小圆心在直线 ON 上时，其心射投影为圆，如图 8-25(d) 所示；小圆心在与投影面平行的直线上时心射投影是双曲线，如图 8-25(e) 所示，其他情况是椭圆或抛物线，如图 8-25(f)所示.

图 8-26 是球面经纬线网的心射投影，称为心射投影网. 图中的分度为 10°，参考球半径为 2cm. 心射投影网与心射投影的关系与吴氏网和极射投影的关系相同.

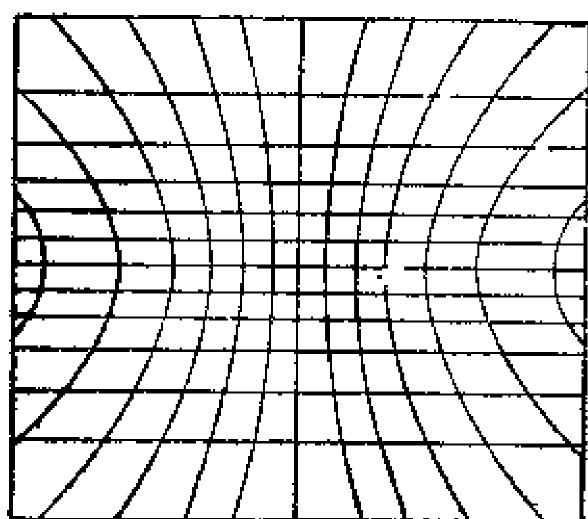


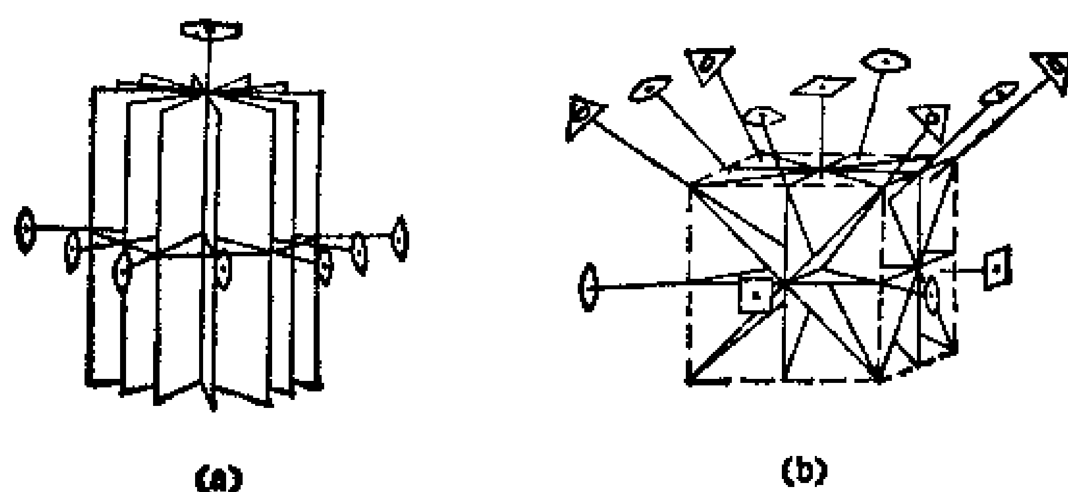
图 8-26　心射投影网，10 分度，参考球半径为 2cm

六、极射投影的应用

极射投影在表达晶体对称性、取向、解衍射谱和研究晶体的形变、相变过程及描述力学、物理、化学性质的各向异性等方面，都有广泛的应用.

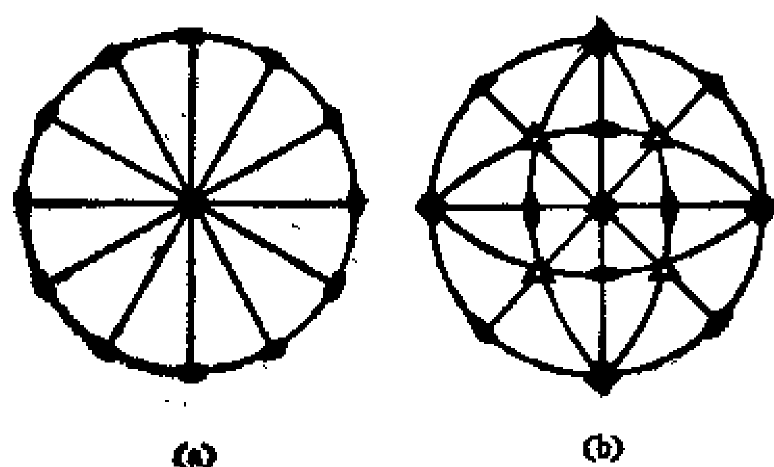
(一) 晶体对称性的描述

图 8-27 (a)、(b) 分别为六方晶系与立方晶系中的 $6/m\ 2/m\ 2/m$ 与 $4/m\ \bar{3}\ 2/m$ 点群，图 (a) 中给出了 6 个与六次轴平行的对



(a) (b)

图 8-27 六方晶系的 $6/m\ 2/m\ 2/m$ 点群和立方系的 $4/m\ \bar{3}\ 2/m$ 点群



(a) (b)

图 8-28 点群的极射投影

(a) $6/m\ 2/m\ 2/m$ 点群的投影；(b) $4/m\ \bar{3}\ 2/m$ 点群的投影

称面，6个在对称面上且与六次轴垂直的二次轴和一个与六次轴垂直的对称面；图(b)中给出了3个四次轴，4个三次轴，6个二次轴和9个对称面的立体图形．而图8-28是对应于图8-27立体图形的极射投影图．它们实际上都是(001)标准投影．两图相互比较可以看出，利用极射投影表示晶体的对称性要比用立体图形清楚得多。因此，我们不得不在第五章中提前使用了极射投影．

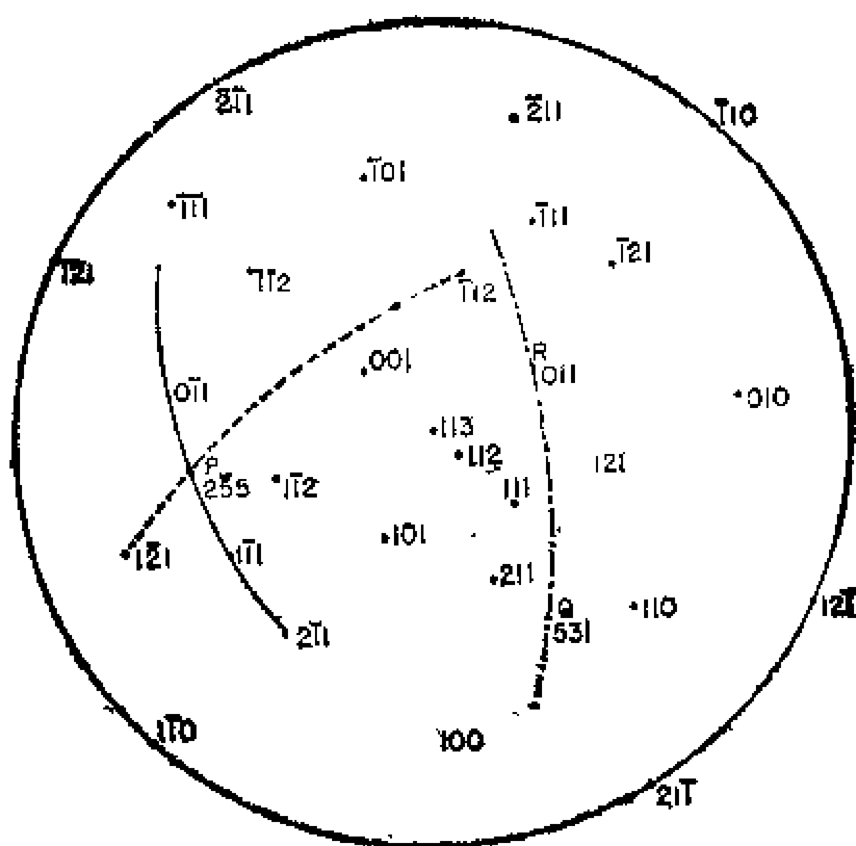


图 8-29　立方晶系的 113 标准投影，图中的实线、虚线和点画线分别表示三个晶带大圆，R、Q、P 分别为它们的带轴

（二）解晶体学问题

1. 求标准投影上某一点的指数

图 8-29 是立方晶系的 113 标准投影，图中的 P_1 点是两个大圆的交点(实线与虚线)，下面介绍求 P 点指数的方法:

(1) 利用 P 点是两个大圆的交点这一条件和晶带方程，可以求出 P 点的指数 hkl.

由晶带方程得知，在同一条晶带大圆上的各极点之间，其指数应有下述规律

$$h = mh_1 \pm nh_2$$

$$k = mk_1 \pm nk_2$$

$$l = ml_1 \pm nl_2$$

其中 m、n 必为整数。对于实线所示的晶带大圆，取 $h_1k_1l_1$ 为 $0\bar{1}1$，$h_2k_2l_2$ 为 $1\bar{1}1$，于是：

当 $m=1$，$n=1$ 时　　$hkl=1\bar{2}2$

$m=2$，$n=1$ 时　　$hkl=1\bar{3}3$

$m=3$，$n=1$ 时　　$hkl=1\bar{4}4$

$m=1$，$n=2$ 时　　$hkl=2\bar{3}3$

$m=3$，$n=2$ 时　　$hkl=2\bar{5}5$

⋮　　⋮　　⋮

对于虚线所示的晶带大圆，取 $h_1k_1l_1$ 为 $1\bar{2}1$，$h_2k_2l_2$ 为 $\bar{1}12$，于是以同样的方法可以得到

$$hkl=0\bar{1}3,\ 1\bar{3}4,\ 2\bar{5}5\cdots\cdots$$

因此，判断 P 点的指数为 $2\bar{5}5$。

(2) 利用立方晶系中晶向与晶面之间同名的特点，可将图 8-29 中的各极点也看作晶带轴。

以 P 点为晶带轴，其相应的晶带大圆以点画线表示，其上有一极点 R 是实线所示的晶带大圆的带轴，指数为 011。而虚线所示的晶带的带轴 Q 也在点画线大圆上，利用晶带轴 $[uvw]$ 与晶带面指数 (hkl) 之间的关系有：

$$u:v:w=\begin{vmatrix} k_1 & l_1 \\ k_2 & l_2 \end{vmatrix}:\begin{vmatrix} l_1 & h_1 \\ l_2 & h_2 \end{vmatrix}:\begin{vmatrix} h_1 & k_1 \\ h_2 & k_2 \end{vmatrix}$$

可以得到 Q 点的指数为 531。此时，可以再次利用上式求得 P 点的指数为 $2\bar{5}5$。

(3) 如果能象图 8-30 立方晶系 001 标准投影那样，测得 P 点与{100}向极点之间的夹角 ϕ，利用：

$$\cos\phi=\frac{h_1h_2+k_1k_2+l_1l_2}{\sqrt{h_1^2+k_1^2+l_1^2}\sqrt{h_2^2+k_2^2+l_2^2}}$$

有：

$$\cos 56° = \frac{l}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$$

$$\cos 48° = \frac{k}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$$

$$\cos 60° = \frac{h}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$$

于是:

$$h:k:l = \cos 60° : \cos 48° : \cos 56°$$

$$= 0.500:0.669:0.559.$$

即 P 点指数近于 687

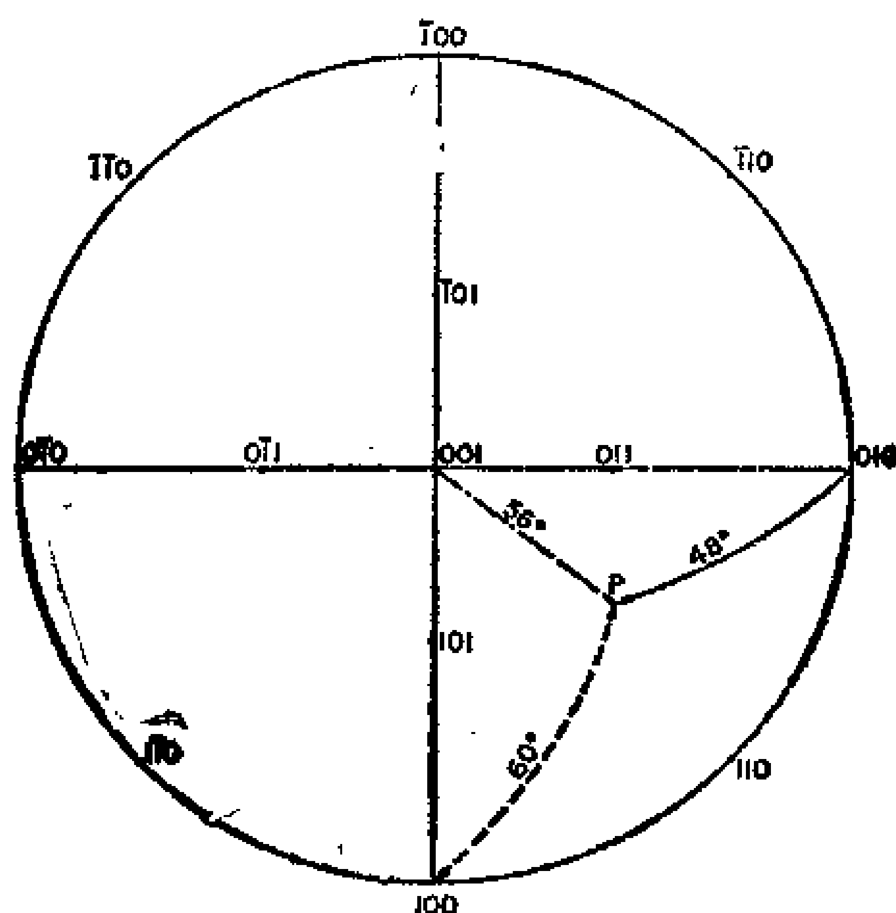


图 8-30 立方晶系的 001 标准投影,图中给出了 P 点与三个{100}面极点之间的夹角

2. 迹线分析

(hkl) 面的迹线是指 (hkl) 面与试样表面 (pqr) 的交线。[uvw]方向的迹线是指 [uvw] 方向在试样表面上的投影。迹线分

析是利用极射投影寻求迹线，(hkl) 面或$[uvw]$方向指数与试样表面指数之间的关系。

例如已知某立方晶系试样的表面指数为(122)，又能在试样表面上观察到迹线 AB，并且测得 AB 与试样棱 NS 之间的夹角为30°。可以在 122 标准投影上表达上述结果，如图 8-31 所示。迹线 AB 的极射投影应为 A、B 两点，但为了后续作图方便，绘出 AB 直线。于是产生迹线 AB 的晶面极点应在 AB 的垂直线 CD 上。例如$(12\bar{1})$面的面痕与基圆交于 A、B，所以它与试样表面相交可以产生迹线 AB。(001)、(121)面等都可以产生迹线 AB。因此，只有当再测得另一条不同方向的 (hkl) 面迹线时，才能确定 (hkl) 面的指数。

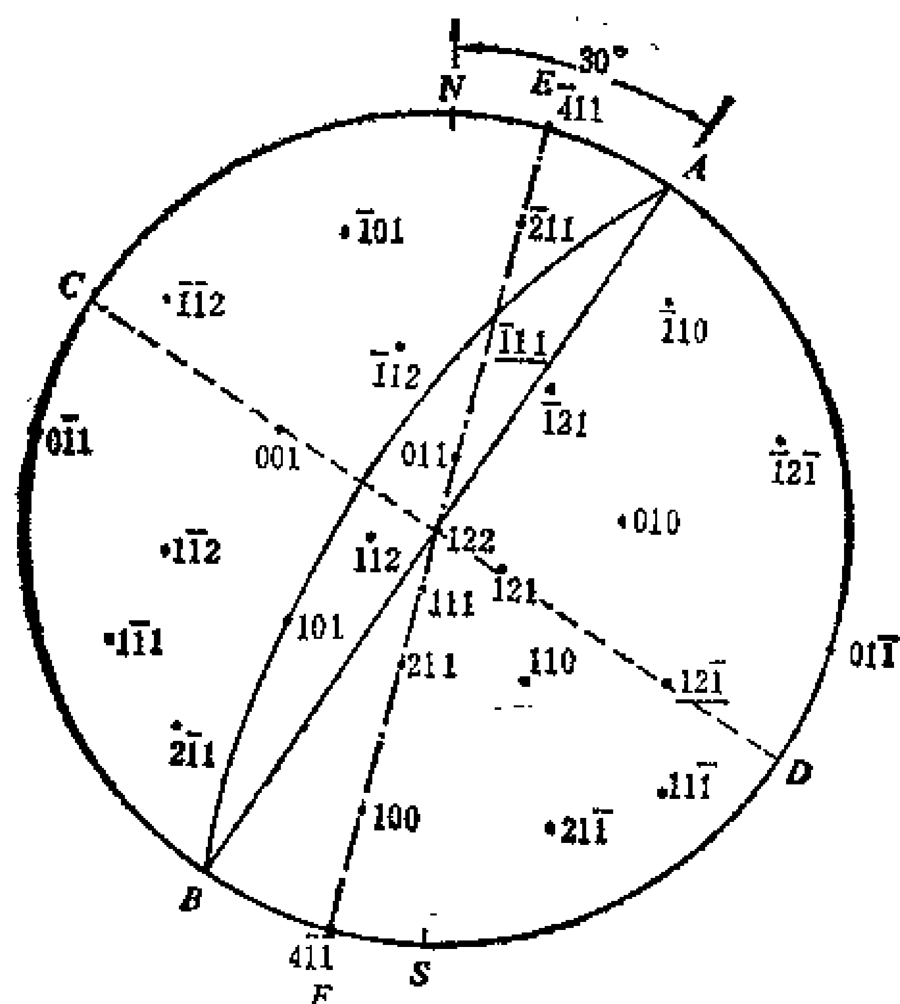


图 8-31　试样表面为(122)时的迹线分析，AB 为(hkl)面的迹线，EF 为$[uvw]$方向的迹线，CD 为 AB 的垂线

按方向迹线的定义，如果图 8-31 中 EF 为 $[uvw]$ 方向的迹线，则该方向的指数可能是[100]、[211]、[111]…。

自然，在已知试样表面指数和晶面或晶向指数时，就能够很方便地利用极射投影预计它们的迹线方位。

(三) 变形系统的测定

晶体的塑性变形主要有两种方式——滑移和孪生。简单地说，滑移就是两层原子面之间沿一定方向的相互滑动，称该原子面为滑移面，该方向为滑移方向(图 8-32)，两者结合成滑移系统，孪生也是原子面之间的相对滑动，但它是在一部分晶体中各个面之间的协同滑动。图 8-33 是体心立方金属的(110)面视图，孪生面为$(1\bar{1}2)$，孪生方向为$(\bar{1}11)$。图示中的孪晶部分为晶体的协同切变部分。它与未切变部分以孪生面为镜面对称。

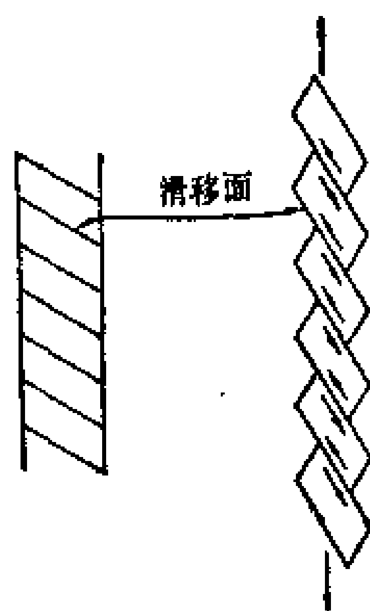


图 8-32 滑移面与滑移方向

利用迹线分析方法，可以测定滑移面、孪生面指数。下面以双面法为例加以说明。

在待测的晶体（单晶或大晶粒）上，磨出两个平面，如图 8-34 (a) 中的 A 与 B 面。两平面的交棱为 NS，夹角为 ϕ，这里 $\phi=90°$.使晶体变形，于是滑移面 (hkl) 分别在 A、B 面上形成迹线，a 和 b 与 NS 棱的夹角分别为 α 和 β。面 A 与 B 的法向分别为 X 与 Y。

首先以 A 面平行于投影面，获得图 8-34(b)，迹线 a 表明滑移面法线应在与其垂直的直线 CD 上；再使投影面与 B 面平行，得图 8-34 (c)，此图表明滑移面法线应在与 b 相垂直的线 EF 上。图 8-34(b) 和(c) 中外形的极点 X、Y 在不同位置，为使

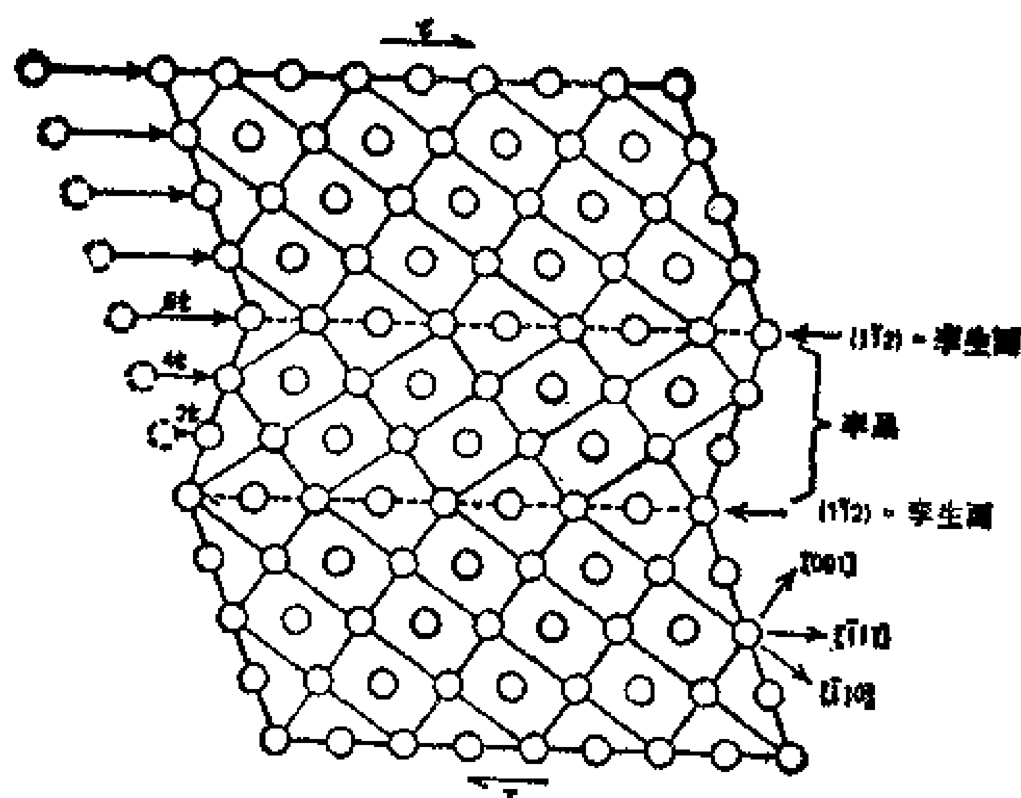


图 8-33　体心立方金属中的孪生，$(1\bar{1}2)$为孪生面，$[\bar{1}11]$为孪生方向，图面为（110）面，孪生面两侧的晶体呈镜像反映

两投影能相互重合，需将图 8-34(c) 反时针旋转 90°，这时迹线 b 变成图 8-34(d)中的虚线，将图(b)与图(d)重合，获得 CD 与 EF 线的交点 P。P 点就是滑移面的极点。

（四）表示两部分晶体之间的取向关系

新相和老相，孪生的两部分，单晶中的亚晶粒等，都存在两部分晶体之间的取向关系问题。此处，仅介绍一种简单的、两部分晶体结构相同的情况。这时，可以认为一部分晶体是另一部分绕某轴$[uvw]$转一定角度的结果。

A、B 两部分晶体的取向由图 8-35 中的极点表示。极点指数的下角标 A、B 分别表示它们属于晶体的哪一部分。为了寻找 A、B 两部分之间的取向关系，先找出两部分的同名极点，例如

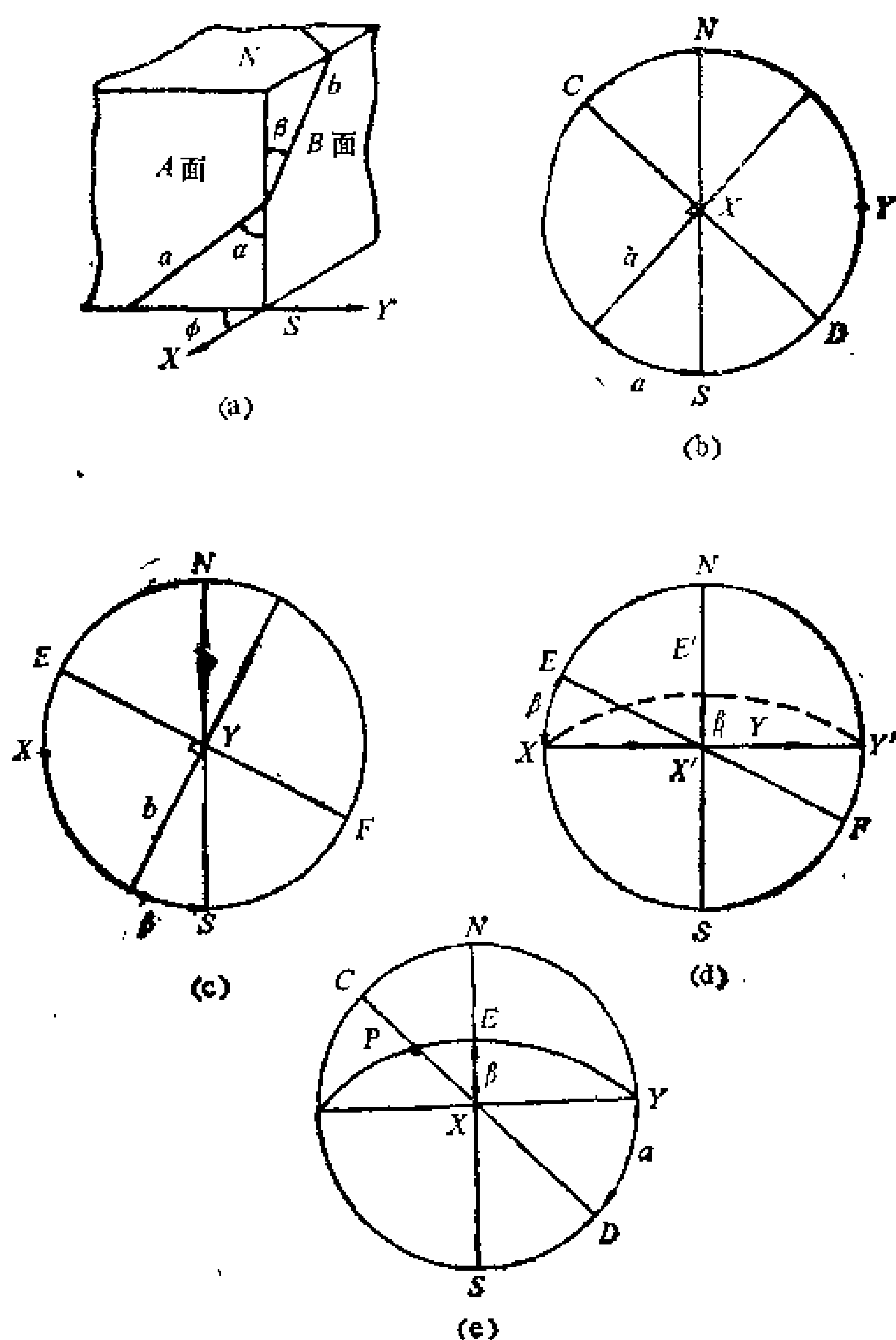


图 8-34 双面法确定滑移面

(a) 单晶体上两个相互垂直的磨面 A、B 与滑移面迹线 a、b；(b)和(c)分别为投影面平行于 A、B 时的投影，CD 与 EF 分别为迹线 a 与 b 的垂直线，(d)中的虚线大圆为反时针转动后的 EF 线；(e)为转动后的(c)与(d)图形的重叠，CD 与 EF 两条线交于点 P

001_A 与 001_B 求出它们的带轴，如 P_{001}，再过带轴与两同名极点的中点作大圆；同时，过 100_A 与 100_B 的中点与它们的带轴 P_{100} 也作大圆。于是两个大圆的交点 P_R 就是联系晶体 A、B 两部分之间的转轴。如果将 P_R 转到基圆上，就能够找到两部分晶体之间的转动角度。

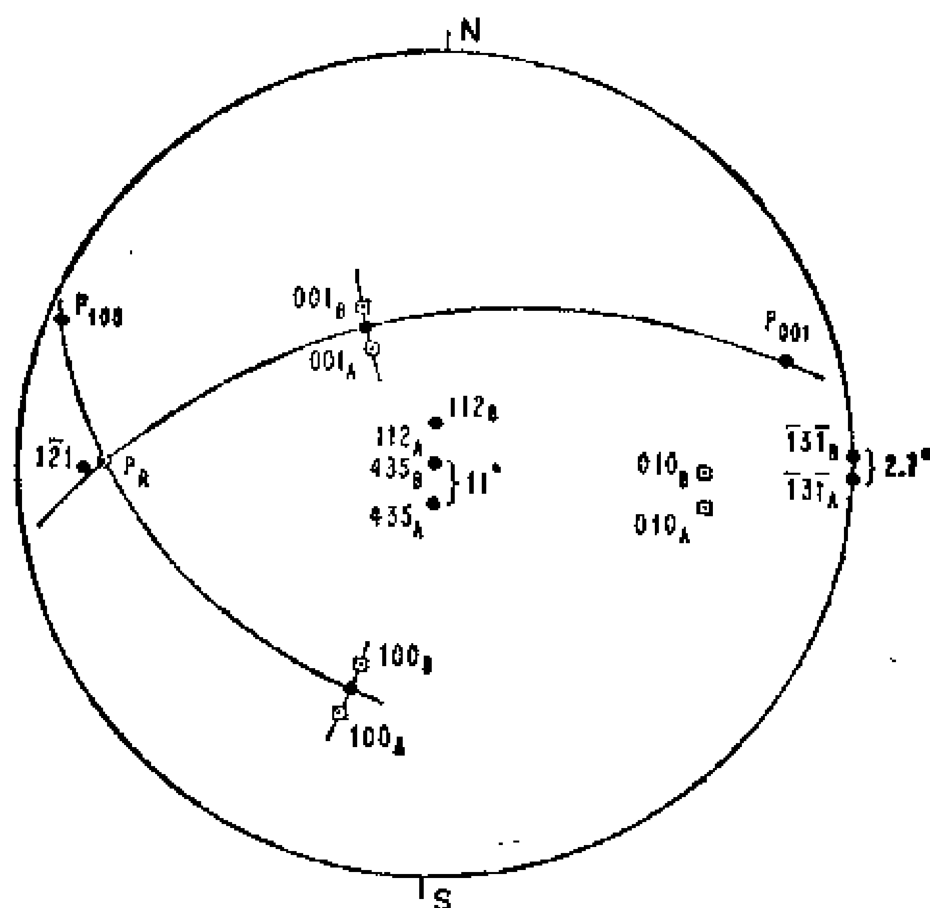


图 8-35 利用极射投影寻找 A、B 两部分晶体之间的取向关系，极点指数的下角标 A、B 是它们各自所属晶体部分的标记

如果过图 8-35 中各对同名极点的中点，分别作与各对极点正交的大圆，则它们的交点也是 P_R。

（五）塑性变形的表示

如果一个横断面为 A 的单晶圆柱体，受拉力 P，如图 8-36 所示，滑移面为图中的阴影线椭圆，其法线为 ON，滑移方向为 OD，

OD 与 OP 成角为 λ, ON 与 OP 成角为 ϕ,则滑移面上的切应力为

$$\tau = \frac{P\cos\lambda}{A/\cos\phi} = \sigma\cos\lambda\cos\phi$$

其中 $\sigma = P/A$,是A面上的应力,应力作用的方向称为应力轴。

作用在滑移面上且能使其开始运动的切应力称为临界分切应力,记为 τ_c. τ_c 的大小由晶体的性质决定，不随外力的作用方向而改变。由:

$$\sigma = \frac{\tau_c}{\cos\lambda\cos\phi}$$

看出,对一定的材料,一定的滑移系统，能够引起滑移的外力大小由 λ 与 ϕ 角决定,即由晶体的取向决定。当 $\lambda = \phi = 45°$时, $\cos\lambda$ $\cos\phi$ 有最大值。于是,这时产生滑移要求的外力最小。

记:

$$m = \frac{\tau_c}{\sigma} = \cos\lambda\cos\phi$$

称 m 为斯密特 (Schmid) 因子。

1. 给定滑移系统、能够求出对应于切应力最大的应力轴。

图 8-37 给出了面心立方晶体中的(111)[$\bar{1}$01]滑移系统。 可以利用极射投影找到对此滑移系统产生最大分切应力的应力轴。为此,可以在极射投影上分别以($\bar{1}$01)和(111)极点为心,作两个与它们相距 45° 的小圆,即图中的虚线所示。于是两小圆的交点 A,就是所要求的应力轴。极点A离极点($\bar{1}$35)最近。 ($\bar{1}$35)距($\bar{1}$01)为 44.18°,距(111)为 46.91°。因此，对于面心立方的{111}⟨110⟩滑移系，或体心立方的{110}⟨111⟩滑移系,⟨135⟩极点是使滑移系统获得最大分切应力的应力轴。

此种应力轴的极点,也可以用另外的方法获得,即过滑移面极点和滑移方向迹点,如图中的(111)和[$\bar{1}$01],作大圆,它是[1$\bar{2}$1]晶

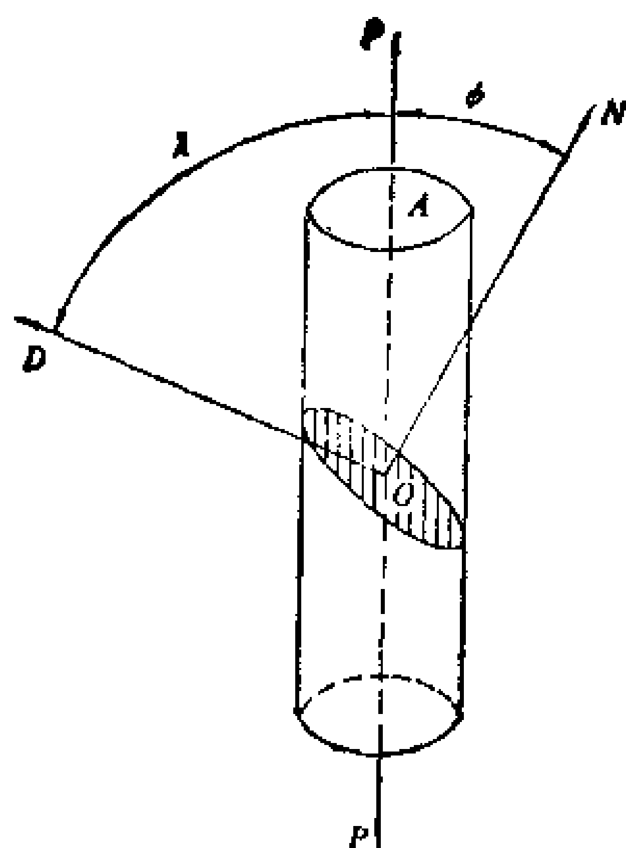


图 8-36　临界分切应力的计算，P 为拉力方向，圆柱单晶的横断面为 A，阴影面为滑移面，ON 为其法线，OD 为滑移方向，λ、φ 分别为 OD、ON 与 OP 之间的夹角

带大圆，在此大圆上与面极和方向迹点等距离的点就是所要求的极点 A。

2. 给定应力轴的方位，可以分析能起作用的滑移系统。

在立方晶系的 001 标准投影上，可以分成 24 个等价三角形。图 8-38 中以方括号内的数字表示当应力轴在各三角形内时能起作用的滑移系统。例如，当应力轴在 OBC 三角形中时，能起作用的滑移系统为(111)[$\bar{1}$01](面心时)或($\bar{1}$01)[111](体心时)。当应力轴落在 0B、0C、CB 等线上时，则是线两边的两个三角形内的滑移系统都起作用。例如当应力轴落在 0B 线上时，滑移系统[111-$\bar{1}$01]和[$\bar{1}$11-101]同时起作用。如果应力轴落在两个大圆的交点上，则邻近此交点的 4 个滑移系统同时起作用。例如当应力轴落在 B 点上时，有[111-$\bar{1}$01]、[111-$\bar{1}$10]、[$\bar{1}$11-110]和[$\bar{1}$11-101] 4 个

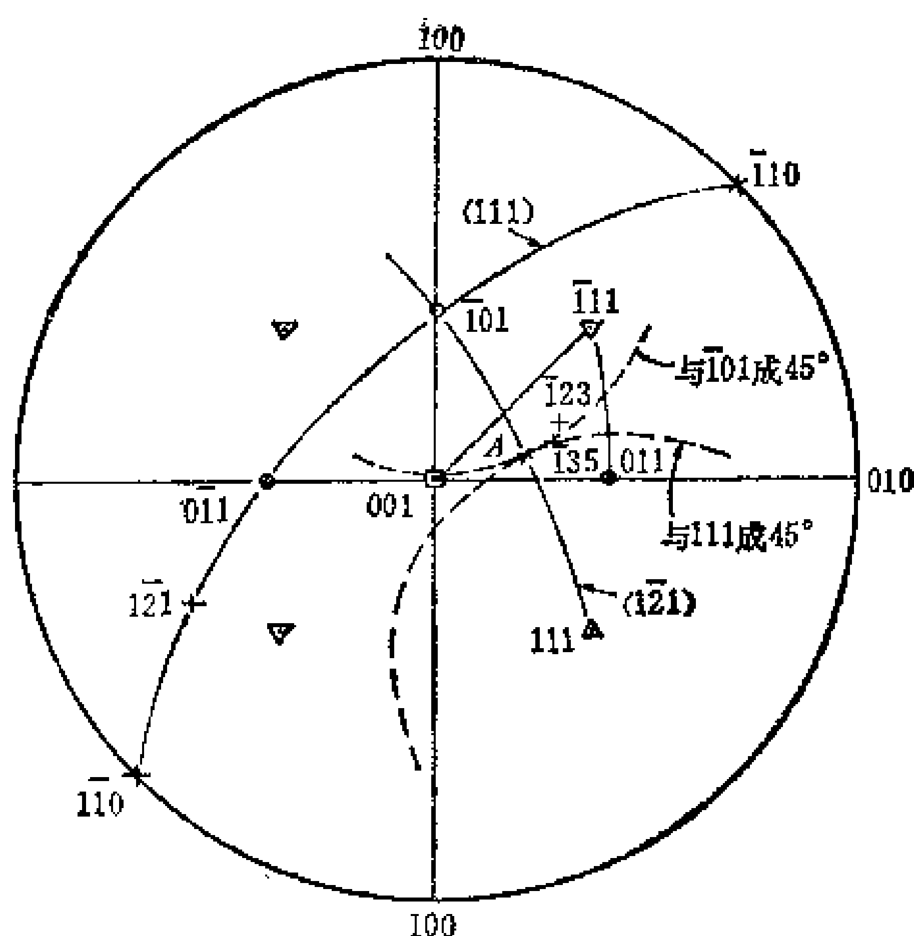


图 8-37 对给定的滑移系统，找到获得最大分切应力时的应力轴极点的方法，虚线是与(111)和($\bar{1}01$)成 45°角的小圆，A 点为两小圆的交点，它也在过($\bar{1}01$)和(111)极点的晶带大圆上，并且与($\bar{1}01$)和(111)等距离

滑移系统同时起作用。如果应力轴落在 3 个大圆的交点上，如 C，则有 6 个滑移系统同时起作用，而当应力轴落在 4 个大圆的交点上时，如 0，则有 8 个滑移系统同时起作用。

对于其他晶系，可以作相似的分析。例如对于 Zn 等 $c/a>1.633$ 的六方晶系的晶体，通常只存在 (0001)⟨11$\bar{2}$0⟩ 滑移系统。当应力轴在 R 处时(图 8-39)，要产生[$\bar{1}\bar{1}$20]-(0001)-[$\bar{2}$110]双滑移。虽然 R 点位置使 (10$\bar{1}$0) 面处于有利地位，但位于其面上的⟨11$\bar{2}$0⟩为[1$\bar{2}$10]，它与 R 成 90°，因此(10$\bar{1}$0)[1$\bar{2}$10]滑移系统不能起作用。

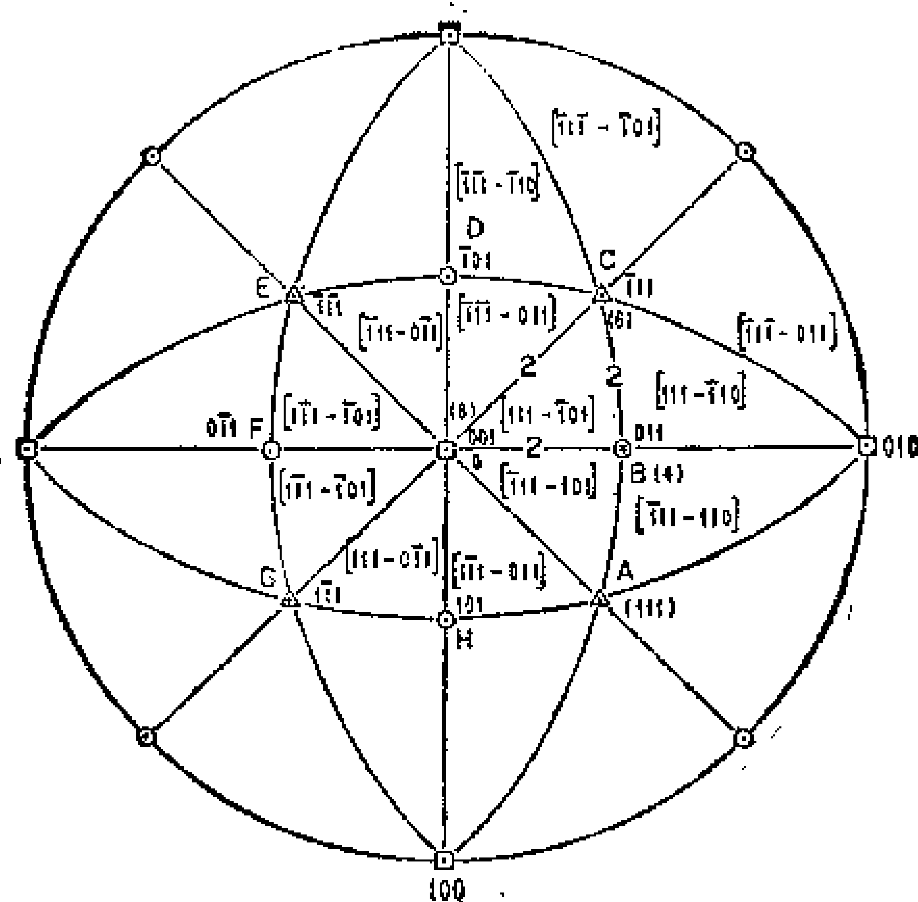


图 8-38　应力轴所在的位置与能起作用的滑移系统，当应力轴在 OBC 三角形中时，能起作用的滑移系统为(111)[$\bar{1}$01]

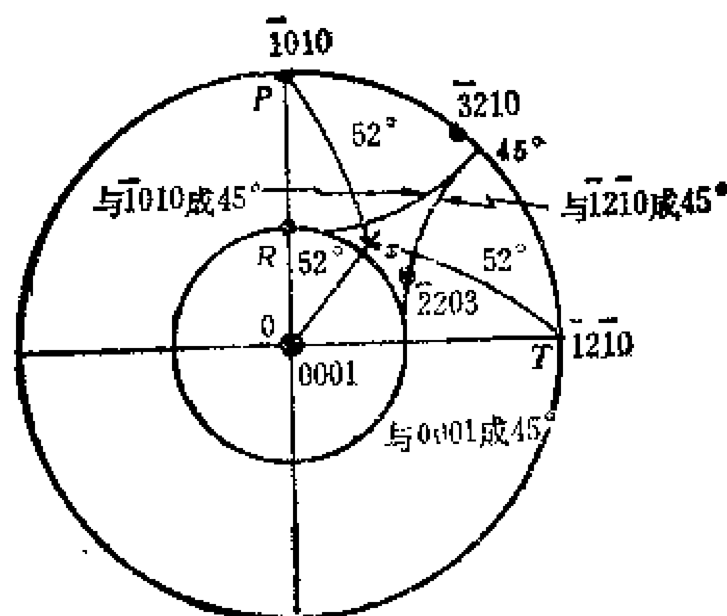


图 8-39　Zn 等六方晶系晶体的[$\bar{1}$120]-(0001)-[$\bar{2}$110]基面双滑移(应力轴为R)和($\bar{1}$010)-[$\bar{1}2\bar{1}0$]-(0001)双滑移(应力轴为 x)

只有当应力轴处在 0 *PT* 三角形的中心时，即 *x* 处，它与(0001)、($\bar{1}010$)和[$\bar{1}2\bar{1}0$]都成 52° 角，此时可以产生双滑移(0001)-[$\bar{1}2\bar{1}0$]-[$\bar{1}010$]。

3. 变形时应力轴的转动

在实际变形过程中，滑移总不能自由进行，要受到某种限制，从而引起晶体转动。拉伸时，由于夹头的限制，使滑移方向朝应力轴方向转动；压缩时，由于压模的限制，使滑移面法线朝应力轴方向转动。这种转动过程可以用极射投影来表示。图 8-40 为拉伸某面心立方晶体时，应力轴取向的变化情况。应力轴的初始位置是 *P*，此时(111)[$\bar{1}01$]滑移系统处于有利地位，滑移过程中应力轴 *P* 朝滑移方向[$\bar{1}01$]运动，自然是沿 *P* 与[$\bar{1}01$]取定的大圆运动。而当应力轴到达两个等价三角形的边上时，则(111)[$\bar{1}01$] 和 [$\bar{1}\bar{1}1$]

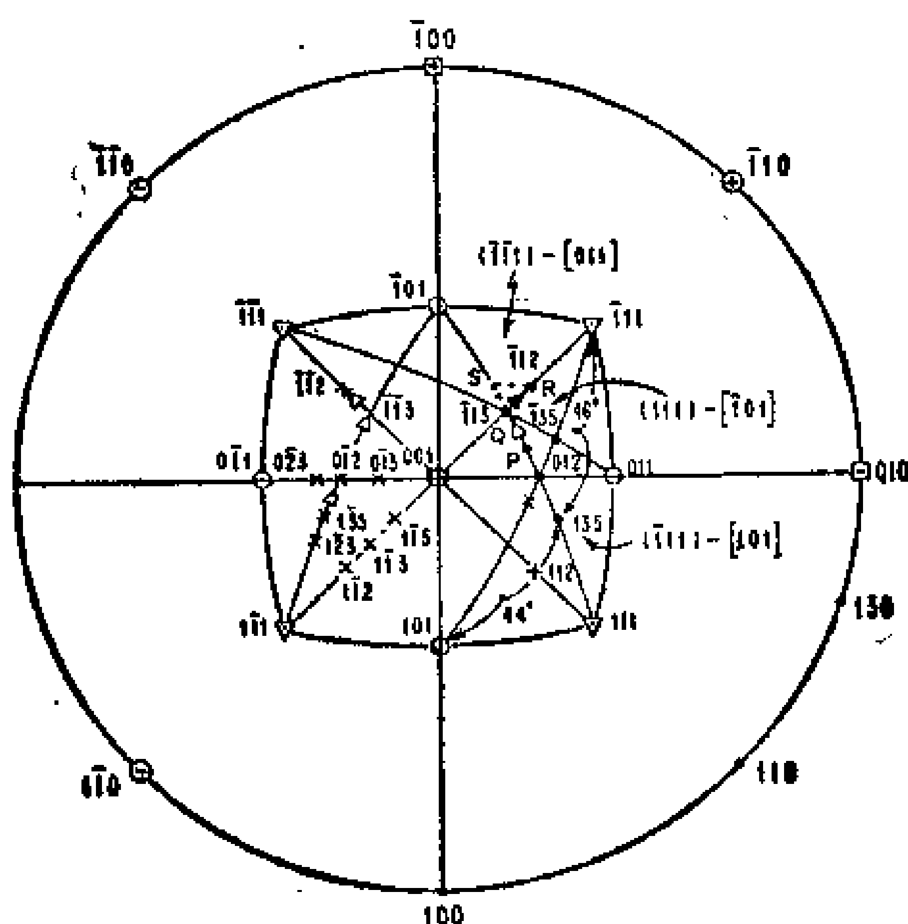


图 8-40　面心立方晶体拉伸时应力轴 P 朝滑移方向转动，引起双滑移，最终位置为 *R*

[011]两个滑移系统处于相同的优势，双滑移开始。于是应力轴开始朝[$\bar{1}$01]+[011]=[$\bar{1}$12]方向运动，当它到达[$\bar{1}$12](即 *R*)时，便停止运动。而实际上观察到的应力轴运动轨迹往往为 $P \to Q \to S \to R$。也就是，当应力轴达到 *Q* 点后，仍然是(111)[$\bar{1}$01]滑移系统在起作用，它到 *S* 点后($\bar{1}\bar{1}$1)[011]滑移系统起作用，(111)[$\bar{1}$01]滑移系统不再起作用。这样往复多次，最终使应力轴停止在 *R* 处。

4. 斯密特因子图

1965 年 Hartley 和 Hirth 将斯密特因子 $m = \cos\lambda\cos\phi$ 等高线绘制在极射投影上，构成所谓斯密特因子图。图 8-41 中作图时以滑移面极点为投影中心，滑移方向为北极。利用这样一张

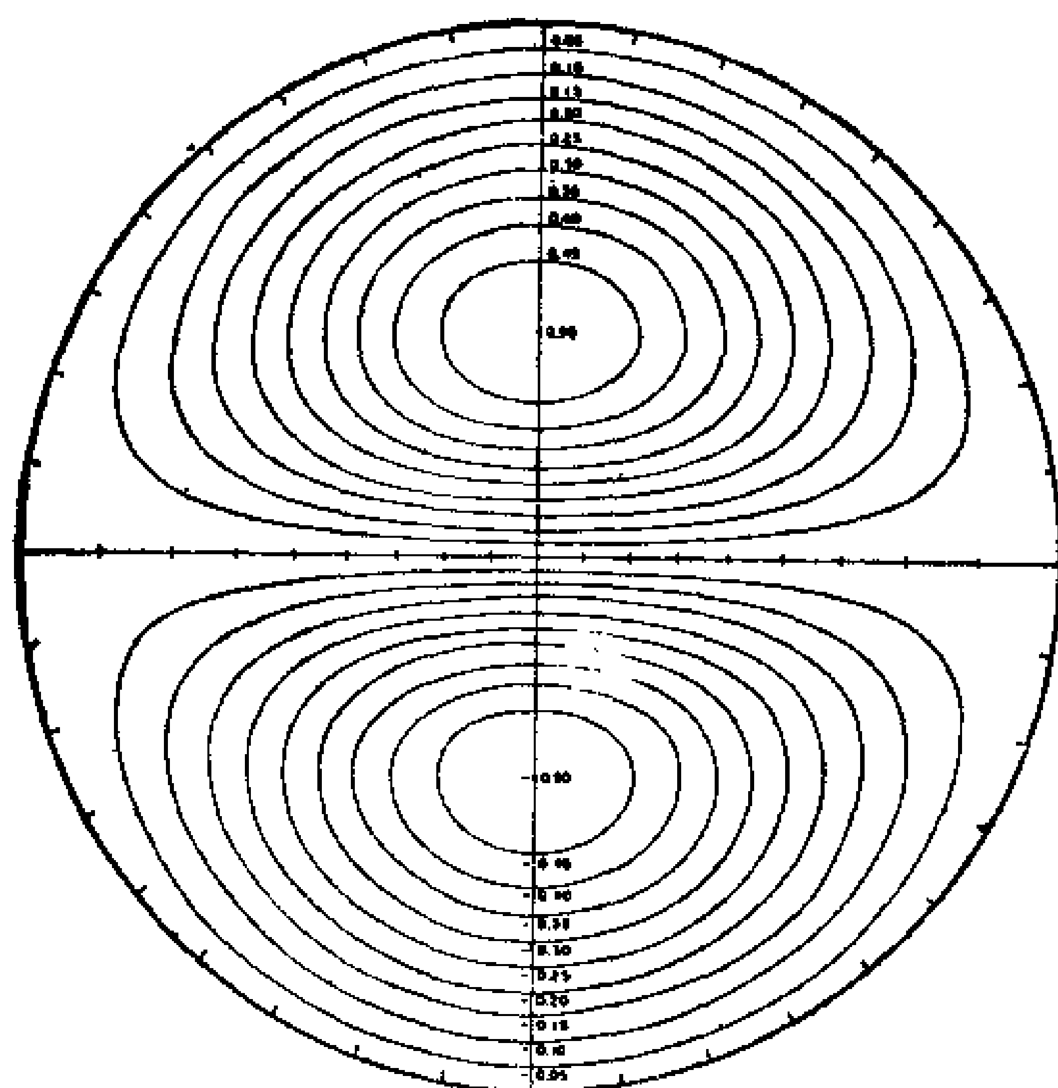


图 8-41 拉伸或压缩时的斯密特因子图

图可以立刻判定所考虑的滑移系统的斯密特因子。例如要考虑(111)[1̄01]滑移系时，可以将 111 标准投影与斯密特因子图重合，使北极为[1̄01]。 图 8-42 仅给出标准投影中的两个等价三角形，上方的三角形相当于图 8-38 中的 *OBC* 三角形。这时就可以判断应力轴为任何位置时的斯密特因子。

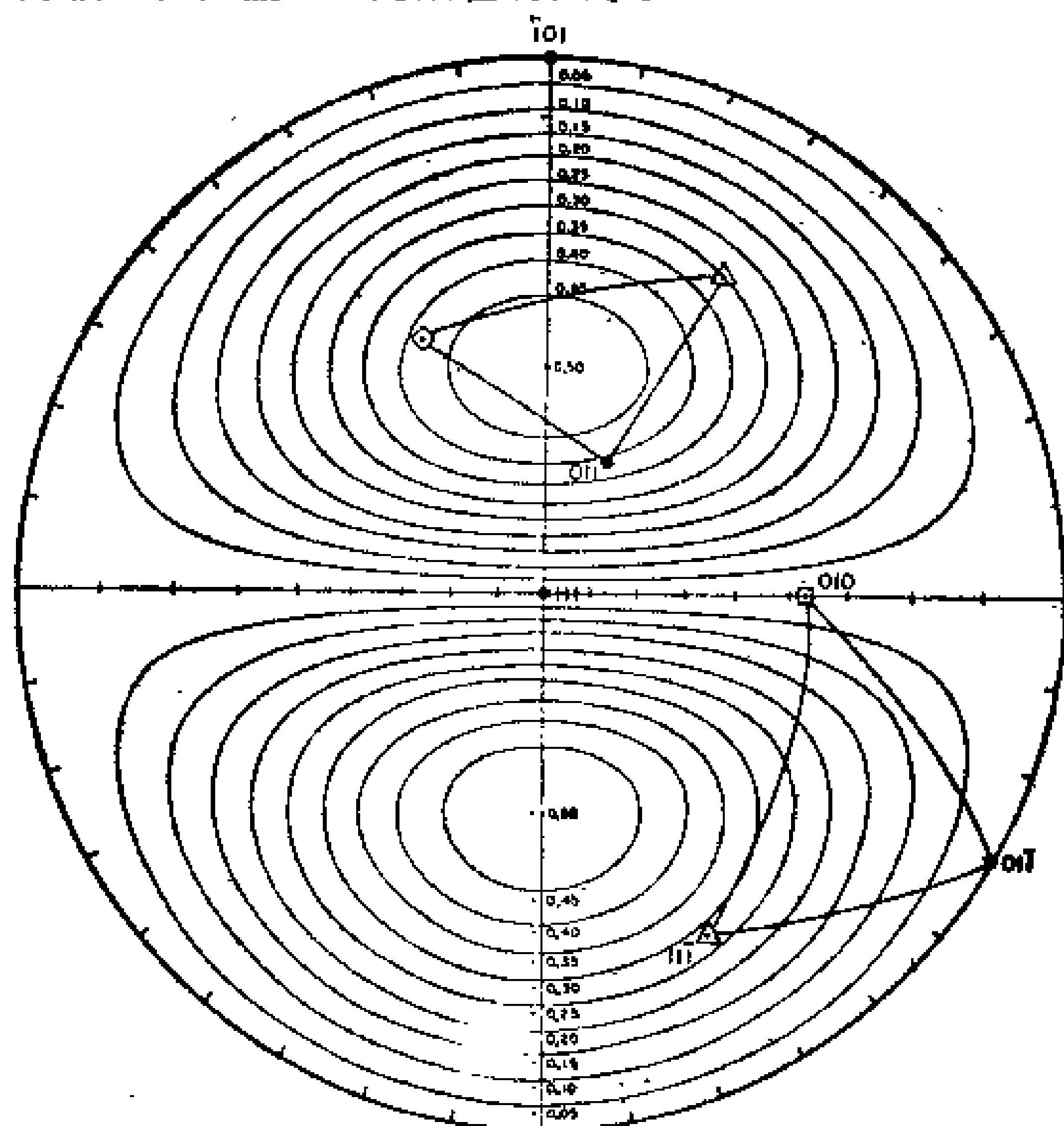


图 8-42 面心立方晶体拉伸时单滑移系统的斯密特因子图，111 标准投影与斯密特因子图重合，北极为[101]

5. 孪生伸长和缩短区的表示

晶体发生孪生时，有两个不变形面 κ_1、κ_2 和两个不变形方向 η_1、η_2，如图 8-43 所示。κ_1 与 κ_2 面的夹角为 2ϕ。孪生过程是 κ_1 面(称孪生面)上半部原子沿 η_1 方向(称孪生方向)的切变过程。如图

中所示，孪生过程中原晶体中的 A、B、C 位置分别移动到 A'、B'、C' 位置。变形前后的长度变化是 $\overline{OC} > \overline{OC'}$，$\overline{OA} = \overline{OA'}$，$OB < OB'$。即在 2ϕ 为锐角区内的晶体孪生后缩短，2ϕ 在钝角区内的晶体，孪生后伸长。

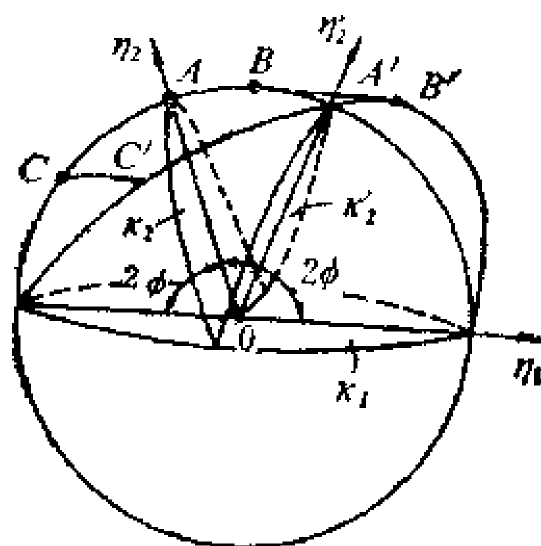


图 8-43 在晶体中取以 O 为心的球，κ_1、κ_2 与 η_1、η_2 分别为孪生时的两个不变形面和方向，κ_1 与 η_1 为孪生面与方向，κ_2' 为孪生后 κ_2 的位置

对于六方晶系，κ_1、κ_2 都是$\{10\bar{1}2\}$面。图 8-44(a)、(b) 分别为 Zn($c/a = 1.86$) 和 Be($c/a = 1.58$) 的 0001 标准投影，投影中绘出了 6 个$\{10\bar{1}2\}$面的面痕。对于 Zn，$\{10\bar{1}2\}$ 与$\{0001)$面之间的夹角是 47.1°，所以在标准投影的中心部分 κ_1、κ_2 面之间的夹角 2ϕ 为锐角。因此当图(a)中的 1、2 大圆为孪生不变形面时，则图(a)中的影线区为晶体缩短区，其他为晶体的伸长区；而对于 Be，$\{10\bar{1}2\}$与(0001)面之间的夹角为 42.4°，所以图(b) 中的影线区为晶体的孪生伸长区。因此，Zn 与 Be 的孪生伸长区与缩短区刚好相反。同时，凡 $c/a > \sqrt{3}$ 的晶体(0001)标准投影中伸长缩短区域都与 Zn 相同，而 $c/a < \sqrt{3}$ 的晶体，情况则与 Be 相同。

实际上，发生孪生时可以是 3 个系统，6 个$\{10\bar{1}2\}$面同时起作用。$\{10\bar{1}2\}$大圆将标准投影中的(0001)-$\{10\bar{1}0\}$-$\{11\bar{2}0\}$三角形分

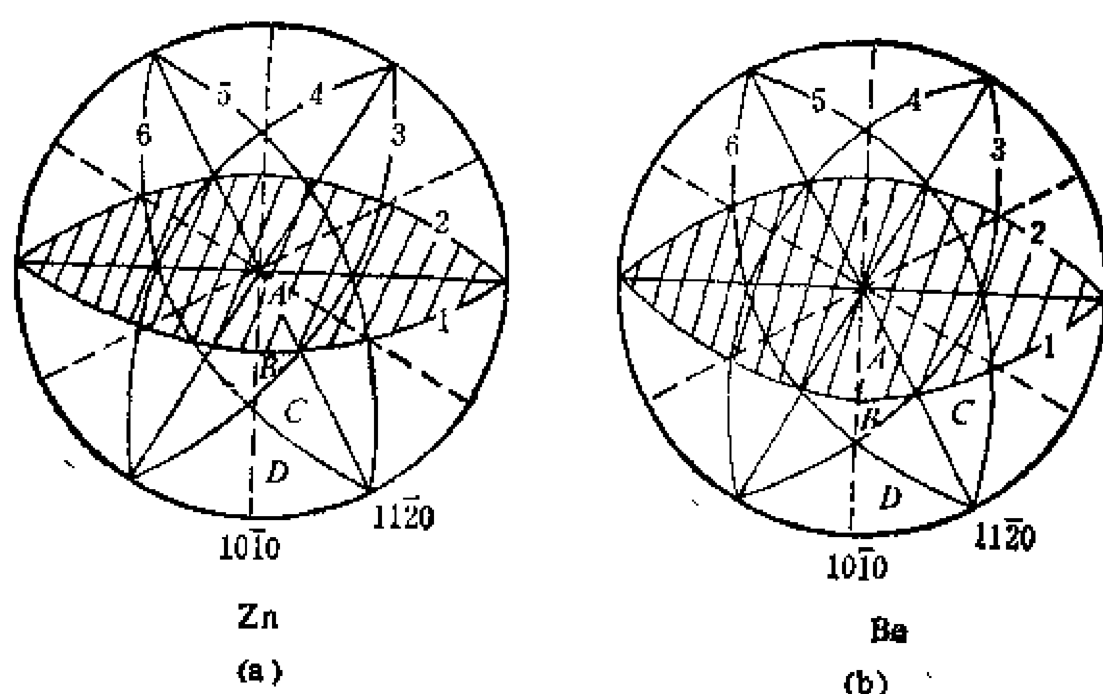


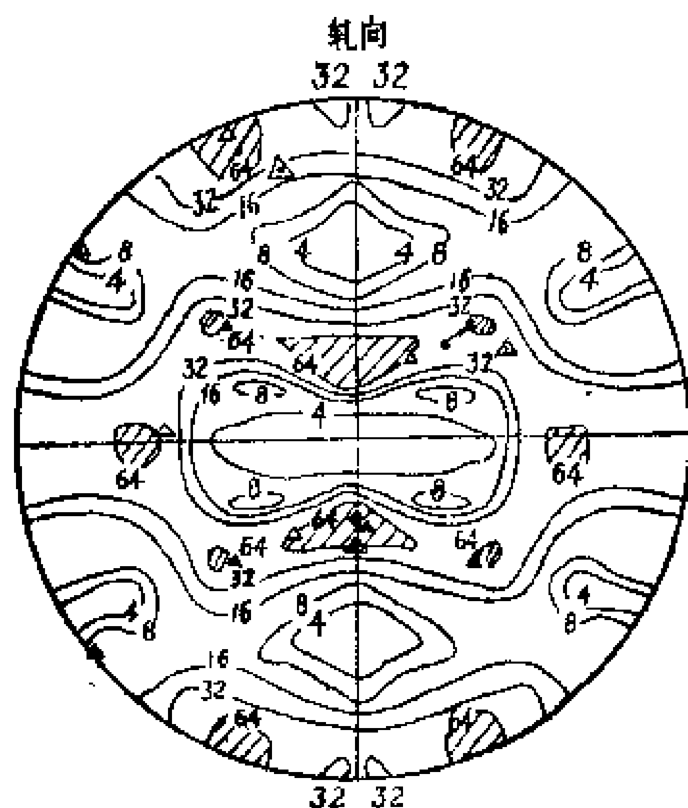
图 8-44 两种 c/a 不同的六方晶体的(0001)标准投影，图中分别用字数 1、2、3、4、5、6 标出了六个 $\{10\bar{1}2\}$ 大圆，并用字母 A、B、C、D 标出这些大圆将三角形 (0001)-($10\bar{1}0$)-(1120)分成的区域

(a) Zn; (b) Be

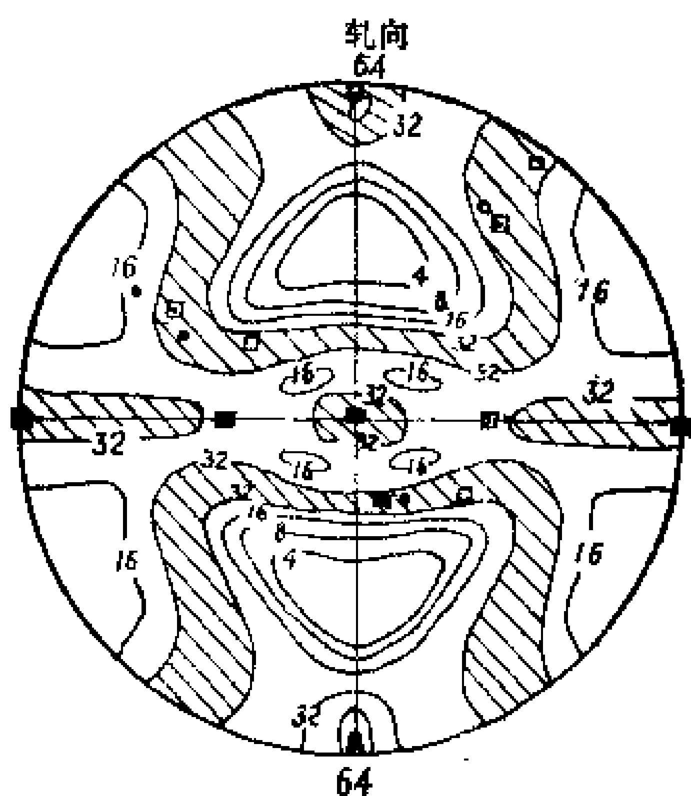
成 4 个区域，发生孪生时，每个区域内的情况相同，各个区域之间的情况不同，例如，在 Zn 标准投影的 (0001)-($10\bar{1}0$)-($11\bar{2}0$)三角形中，有 A、B、C、D 4 个区域，在 A 区内，3 组孪生都引起晶体缩短，在 D 区内 3 组孪生都引起晶体伸长，而在 B 区内 3、4 和 5、6 两组孪生引起缩短，1、2 孪生引起伸长，在 C 区内只有 5、6 孪生引起缩短，其他引起伸长。Be 的情况与 Zn 完全相反。

（六）多晶体中晶粒取向的描述

如果把多晶体试样放在如图 8-7 所示的参考球中心，考察各个晶粒中某同一指数晶面的极点相对外形的分布，则构成所谓极图。于是，用极图可以描述多晶体中各个晶粒的取向。图 8-45(a)、(b)分别为冷轧 Th 板的{111}和{200}极图，即{111}极点与{200}极点相对于试样外形的分布图，此时的外形取轧面与轧向，轧面法



{111} 极图



{200} 极图

图 8-45 Tb 板(冷轧95%)的{111}(a)和{200}(b)极图，图中的▲、■；▲、◧；△、□、⚠、⊡；●、○分别为轧面与轧向是{001}⟨100⟩；{011}⟨100⟩；{011}⟨211⟩；{113}⟨2$\bar{1}$1⟩和{71222}⟨845⟩时的{111}与{200}极点位置

向为极图的中心。图中曲线或区域中的数字为极的相对密度数。图中的▲、■;◭、◧;△、□;◬、⊡;●、○分别表示当轧面与轧向为{001}⟨100⟩; {011}⟨100⟩; {011}⟨$\bar{2}\bar{1}1$⟩; {113}⟨$\bar{2}\bar{1}1$⟩和{71222}⟨$\bar{8}\bar{4}5$⟩时的{111}与{200}极点位置。

(七) 物理性能的描述

测试出单晶体不同方向的物理性能，可以把它们标注在标准投影上，以显明地表示其变化规律。

对于多晶体材料，可以把物理性能标注到带有外形坐标的极射投影图上。图 8-46 的极射投表示了挤压石墨管 c 轴密度的变化规律。由于石墨晶体的热膨胀系数 $\sigma_c \gg \sigma_a$，因此图 8-46 也是挤压石墨管热膨胀系数的变化规律图。此图表明，挤压石墨管的径向热膨胀系数最大。

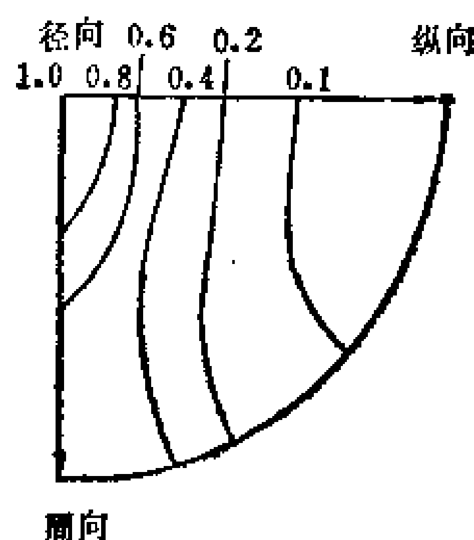


图 8-46 挤压石墨管壁的热膨胀系数变化规律，最大值取 1

练 习 题

1. 请将立方晶系的 001 标准投影转成 112 标准投影。
2. 请画出 432 点群的极射投影图。
3. 请利用 (0001) 标准投影找出能进行双滑移 [0001]-[$\bar{1}2\bar{1}0$]-

$[\bar{1}010]$时的应力轴极点位置。

4. 请利用001标准投影，绘出立方晶体$(\bar{1}11)$反映孪生的{100}极点位置。

5. 已知 α-Fe 的滑移系统为$\{110\}\langle\bar{1}11\rangle$，请利用斯密特图找出最利于$(110)[\bar{1}11]$滑移的应力轴位置。

复　习　题

1. 请说明球面投影、极射投影和心射投影的关系。
2. 球面投影上的大圆和小圆在极射投影和心射投影上各是什么形状。
3. 请说明吴氏网的用法。
4. 请说明什么是标准投影及它的用途。
5. 请举例说明极射投影的应用范围。

第九章　晶体中的倒易变换

从数学上讲，倒易点阵是与晶体点阵相关的一种几何图形——点阵。晶体点阵是直接从晶体结构抽象而来；倒易点阵则是与晶体点阵一一对应，由晶体点阵演算而来。从物理上讲，晶体点阵与晶体结构相关，描述的是晶体中物质分布的规律，所以说它描述的是物质空间或正空间；倒易点阵与衍射现象相关，描述的是晶体衍射强度的分布，所以说它描述的是衍射空间或倒易空间。

为与倒易点阵相对应，以后称晶体点阵为正点阵。

一、倒易点阵概念

倒易点阵也是几何点在三维空间中有规律的排列阵式，因为它与正点阵有后面介绍的倒易关系，所以称其为倒易点阵。倒易点阵中的点称为倒易结点，可以用倒易矢描述其位置。与正点阵一样，倒易阵胞就完全描述了倒易点阵的形貌。因此，我们从倒易阵胞入手介绍倒易点阵。

给定一个基矢群为 $\boldsymbol{a}$、$\boldsymbol{b}$、$\boldsymbol{c}$ 的正点阵阵胞，则必然有一个与它相对应的倒易阵胞，基矢群为 $\boldsymbol{a}^*$、$\boldsymbol{b}^*$、$\boldsymbol{c}^*$，它们与 $\boldsymbol{a}$、$\boldsymbol{b}$、$\boldsymbol{c}$ 有如下关系：

$$\boldsymbol{a}^* = \frac{\boldsymbol{b} \times \boldsymbol{c}}{v}$$

$$b^* = \frac{\boldsymbol{c} \times \boldsymbol{a}}{v} \tag{9-1}$$

$$c^* = \frac{\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b}}{v}$$

其中 v 是正点阵阵胞的体积，$v = \boldsymbol{a} \cdot (\boldsymbol{b} \times \boldsymbol{c})$. 将(9-1)式分别点乘以 $\boldsymbol{a}$、$\boldsymbol{b}$、$\boldsymbol{c}$，得到：

$$\boldsymbol{a}^* \cdot \boldsymbol{b} = \boldsymbol{a}^* \cdot \boldsymbol{c} = \boldsymbol{b}^* \cdot \boldsymbol{a} = \boldsymbol{b}^* \cdot \boldsymbol{c} = \boldsymbol{c}^* \cdot \boldsymbol{a} = \boldsymbol{c}^* \cdot \boldsymbol{b} = 0$$

$$\boldsymbol{a}^* \cdot \boldsymbol{a} = \boldsymbol{b}^* \cdot \boldsymbol{b} = \boldsymbol{c}^* \cdot \boldsymbol{c} = 1 \tag{9-2}$$

(9-1)或(9-2)式都告诉我们：倒易点阵的 $\boldsymbol{a}^*$ 垂直于正点阵中的 $\boldsymbol{b}$ 和 $\boldsymbol{c}$；$\boldsymbol{b}^*$垂直于 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{c}$；$\boldsymbol{c}^*$垂直于 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$。 可以由(9-1)式的标量形式求出各倒易基矢的大小，即：

$$a^* = \frac{bc \sin\alpha}{v}$$

$$b^* = \frac{ac \sin\beta}{v} \tag{9-3}$$

$$c^* = \frac{ab \sin\gamma}{v}$$

其中：

$$v = abc(1 - \cos^2\alpha - \cos^2\beta - \cos^2\gamma + 2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma)1/2 \tag{9-4}$$

$\boldsymbol{a}^*$、$\boldsymbol{b}^*$、$\boldsymbol{c}^*$ 之间的夹角为：

$$\cos\alpha^* = \frac{\cos\beta\cos\gamma - \cos\alpha}{\sin\beta\sin\gamma}$$

$$\cos\beta^* = \frac{\cos\alpha\cos\gamma - \cos\beta}{\sin\alpha\sin\gamma} \tag{9-5}$$

$$\cos\gamma^* = \frac{\cos\alpha\cos\beta - \cos\gamma}{\sin\alpha\sin\beta}$$

从正阵胞与倒易阵胞的三个基矢之间的关系入手，可以作出与正点阵相对应的倒易点阵。图 9-1 为三斜晶系阵胞 $\boldsymbol{a}$、$\boldsymbol{b}$、$\boldsymbol{c}$ 与

其倒易阵胞基矢 c^* 之间的关系。因为 c^* 垂直于 a、b，所以 c^* 垂直于(001)面。图 9-2 分别给出单斜晶系的正点阵与倒易点阵结点在(001)面和$(001)^*$上的分布。

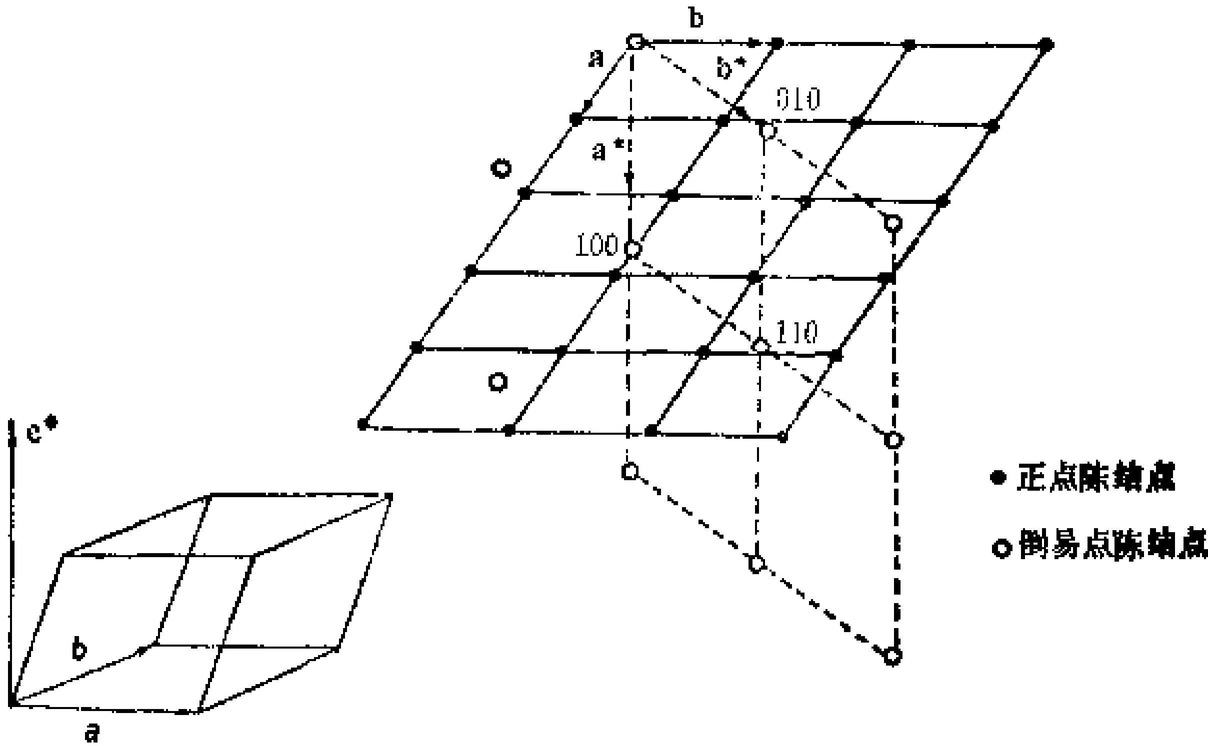


图 9-1 三斜晶系中的正点阵基矢 a、b 与倒易基矢 c^*

图 9-2 单斜晶系(001)面上的正点阵结点"●"与倒易点阵结点"○"，该晶系中由 a^* 和 b^* 构成的面为$(001)^*$面

由(9-3)和(9-5)式，可以得出对于立方晶系，正、倒点阵之间的关系为：

$$a^* = \frac{1}{a}; \quad b^* = \frac{1}{b}, \quad c^* = \frac{1}{c}$$

$$\alpha^* = \beta^* = \gamma^* = 90°$$

即正点阵属于立方晶系时，其倒易点阵也属于立方晶系。表 9-1 列出了与各个晶系相对应的倒易点阵阵胞的基本参数。表中的参数表明：正点阵与其对应的倒易点阵属于同一晶系。

上述的公式与图表说明：正点阵与倒易点阵在单位上是互为倒易的，即正点阵中的长度单位为 Å，体积单位为 $Å^3$；倒易点阵的长度单位为 $Å^{-1}$，体积单位为 $Å^{-3}$。它们的阵胞形状之间是互为

表9-1 倒易点阵阵胞的基本参数

晶系	单斜	正交	六方	菱形	正方	立方
正点阵阵胞特征	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90° \neq \beta$	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90°$	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90°$ $\gamma = 120°$	$a = b = c$ $90° \neq \alpha = \beta = \gamma < 120°$	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90°$	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90°$
阵胞体积	$abc\sin\beta$	abc	$\frac{\sqrt{3}}{2}a^2c$	$a^3\sqrt{1 - 3\cos^2\alpha + 2\cos^3\alpha}$	a^2c	a^3
倒易点阵阵胞参数						
a^*	$\frac{1}{a\sin\beta}$	$\frac{1}{a}$	$\frac{2}{a\sqrt{3}}$	$\frac{\sin\alpha}{a\sqrt{1 - 3\cos^2\alpha + 2\cos^3\alpha}}$	$\frac{1}{a}$	$\frac{1}{a}$
b^*	$\frac{1}{b}$	$\frac{1}{b}$	$\frac{2}{a\sqrt{3}}$	$\frac{\sin\alpha}{a\sqrt{1 - 3\cos^2\alpha + 2\cos^3\alpha}}$	$\frac{1}{b}$	$\frac{1}{a}$
c^*	$\frac{1}{c\sin\beta}$	$\frac{1}{c}$	$\frac{1}{c}$	$\frac{\sin\alpha}{a\sqrt{1 - 3\cos^2\alpha + 2\cos^3\alpha}}$	$\frac{1}{c}$	$\frac{1}{a}$
α^*	90°	90°	90°	$\cos^{-1}\left(-\frac{\cos\alpha}{1 + \cos\alpha}\right)$	90°	90°
β^*	$180° - \beta$	90°	90°	$\cos^{-1}\left(-\frac{\cos\alpha}{1 + \cos\alpha}\right)$	90°	90°
γ^*	90°	90°	60°	$\cos^{-1}\left(-\frac{\cos\alpha}{1 + \cos\alpha}\right)$	90°	90°
特征	$a^* \neq b^* \neq c^*$ $\alpha^* = \gamma^* = 90° \neq \beta^*$	$a^* \neq b^* \neq c^*$ $\alpha^* = \beta^* = \gamma^* = 90°$	$a^* = b^* \neq c^*$ $\alpha^* = \beta^* = 90°$ $\gamma^* = 60°$	$a^* = b^* = c^*$ $\alpha^* = \beta^* = \gamma^* \neq 90°$	$a^* = b^* \neq c^*$ $\alpha^* = \beta^* = \gamma^* = 90°$	$a^* = b^* = c^*$ $\alpha^* = \beta^* = \gamma^* = 90°$

倒易的，即正点阵中的长轴对应其倒易点阵的短轴，正点阵中的短轴对应其倒易点阵的长轴；正点阵中的锐角对应其倒易点阵中的钝角等。同时，可以证明正、倒点阵之间是互为倒易的，即：

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{a} &= \frac{\boldsymbol{b}^* \times \boldsymbol{c}^*}{v^*} \\
\boldsymbol{b} &= \frac{\boldsymbol{c}^* \times \boldsymbol{a}^*}{v^*} \\
\boldsymbol{c} &= \frac{\boldsymbol{a}^* \times \boldsymbol{b}^*}{v^*}
\end{aligned}
\qquad (9\text{-}6)
$$

其中 v^*为倒易阵胞的体积，同时有

$$
v^* = \frac{1}{v} \qquad (9\text{-}7)
$$

也就是说，如果图 9-2 中“●”代表正点阵中的结点，那么“○”就代表倒易点阵中的结点。

二、正、倒点阵之间的倒易关系

为了在进一步阐明正、倒点阵之间的关系时，不至于产生符号上的混淆，先在表 9-2 中定义两点阵之间相应量的符号。各量

表 9-2 正、倒点阵中相应量的符号

量的名称	正点阵中	倒易点阵中
晶面指数	(hkl)	$(uvw)^*$
晶向指数	$[uvw]$	$[hkl]^*$
面间距	d_{hkl}	d^*_{uvw}
晶向或点阵矢量	$\boldsymbol{r}_{uvw} = u\boldsymbol{a} + v\boldsymbol{b} + l\boldsymbol{c}$	$\boldsymbol{g}_{hkl} = h\boldsymbol{a}^* + k\boldsymbol{b}^* + l\boldsymbol{c}^*$
晶向长度或点阵矢量长度	r_{uvw}	g_{hkl}
结点位置	uvw	hkl

之间有下述重要关系。

（一） $[hkl]^* \perp (hkl)$

倒易点阵中的一个方向 $[hkl]^*$ 垂直于正点阵中一列同名的晶面 (hkl)；同时 $[uvw] \perp (uvw)^*$，即正点阵中的一个方向 $[uvw]$ 垂直于倒易点阵中一列同名的晶面 $(uvw)^*$。

可以利用图 9-3 证明上述结论：正、倒点阵的原点都为 O，正点阵的基矢为 $\boldsymbol{a}$、$\boldsymbol{b}$、$\boldsymbol{c}$，晶面 (hkl) 与三基矢分别交于 A、B、C。倒易点阵中的一个方向 $[hkl]^*$ 即为倒易矢 $\boldsymbol{g}_{hkl}$，同时有：

$$\boldsymbol{g}_{hkl} = h\boldsymbol{a}^* + k\boldsymbol{b}^* + l\boldsymbol{c}^*$$

按晶面的定义有：

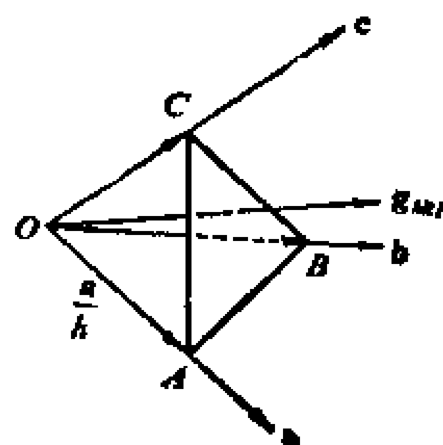


图 9-3 晶面 (hkl) 与倒易矢量 $\boldsymbol{g}_{hkl}$ 之间的关系

$$OA = \frac{\boldsymbol{a}}{h}$$

$$OB = \frac{\boldsymbol{b}}{k}$$

$$OC = \frac{\boldsymbol{c}}{l}$$

由图 9-3 可以看出：

$$AB = OB - OA$$
$$AC = DC - OA$$

于是

$$\boldsymbol{g}_{hkl} \cdot \boldsymbol{AB} = (h\boldsymbol{a}^* + k\boldsymbol{b}^* + l\boldsymbol{c}^*) \cdot \left(\frac{\boldsymbol{b}}{k} - \frac{\boldsymbol{a}}{h}\right)$$

将(9-2)式代入上式，得到：

$$\boldsymbol{g}_{hkl} \cdot \boldsymbol{AB} = 0$$

同理可以证明:

$$g_{hkl} \cdot AC = 0$$

所以:

$$g_{hkl} \perp (hkl)$$

或: (9-8)

$$[hkl]^* \perp (hkl)$$

(9-8)式适用于所有的晶系。

用相似的方法可以证明

$$r_{uvw} \perp (uvw)^*$$

或

$$[uvw] \perp (uvw)^* \tag{9-9}$$

（二） $d_{hkl} = 1/g_{hkl}$

正点阵中的面间距 d_{hkl} 是其同名倒易矢量长度 g_{hkl} 的倒数; $d^*_{uvw} = 1/r_{uvw}$,即倒易点阵中面间距 d^*_{uvw} 是其同名正点阵易量长度 r_{uvw} 的倒数。

因为 $g_{hkl} \perp (hkl)$,所以图 9-3 中 OA、OB 或 OC 在 g_{hkl} 上的投影都是面间距 d_{hkl}。即:

$$d_{hkl} = OA \cdot \frac{g_{hkl}}{g_{hkl}} = \frac{a}{h} \cdot \frac{(ha^* + kb^* + lc^*)}{g_{hkl}} = \frac{1}{g_{hkl}}$$

所以有:

$$d_{hkl} = \frac{1}{g_{hkl}} \tag{9-10}$$

以相似的方法可以证明:

$$d^*_{uvw} = \frac{1}{r_{uvw}} \tag{9-11}$$

(9-8)、(9-9)、(9-10)、(9-11)式说明了正倒点阵之间的基本倒易关系。倒易点阵中的一个结点 hkl 不仅代表着正点阵中一同名面列的取向，也由此点决定的倒易阵矢长度反应出这一面列的面间距。因此，倒易点阵中的一结点代表着正点阵中一个同名面列。于是，倒易点阵中倒易点的分布就代表着正点阵中一系列面列的分布。图 9-4 给出这种对应关系。由此可以看出，倒易点阵可以使正点阵中的问题简化。

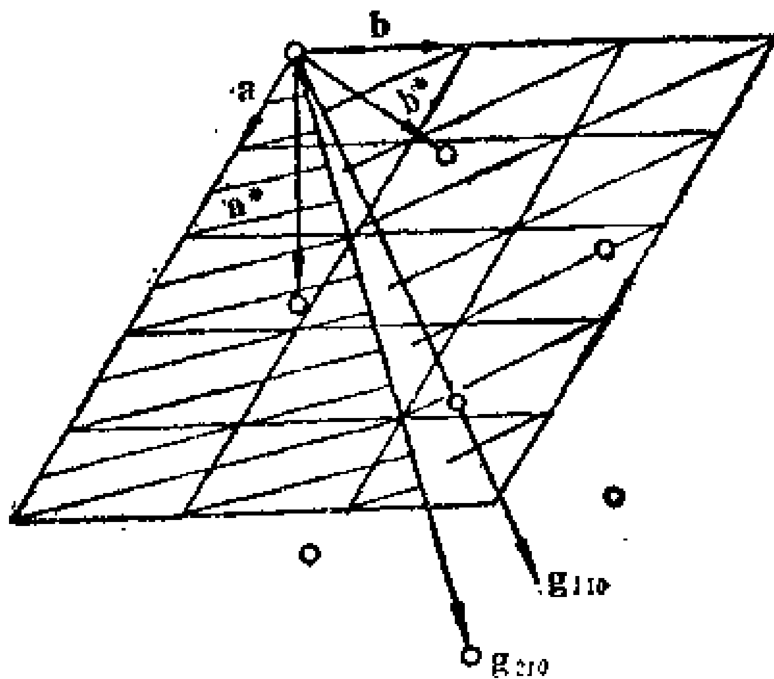


图 9-4　倒易点阵中的结点与正点阵中的面列

三、晶带与倒易面

(一) 晶带与倒易面

图 9-5(a) 给出了[uvw]晶带中的 ($h_1k_1l_1$)、($h_2k_2l_2$) 和 ($h_3k_3l_3$) 3 个晶面。同时由于正点阵中的方向 [uvw] 垂直于倒易点阵中的面 (uvw)*；正点中的面(hkl)垂直于倒易点阵中的方向[hkl]*，即：

$$[uvw]\perp(uvw)^*$$

$$(hkl) \perp [hkl]^*$$

对于晶带轴与晶带中的面有：

$$[uvw] \parallel (hkl)$$

所以：

$$(uvw)^* \parallel [hkl]^*$$

于是，对于属于同一晶带的所有晶面，它们的倒易点阵中的结点应分布在一个过倒易原点的平面上，如图 9-5(b) 所示。也就是说，正点阵中的一个晶带对应着倒易点阵中一个过原点的面，或者说，倒易点阵中一个过原点的平面，代表着正点阵中的一个晶带。

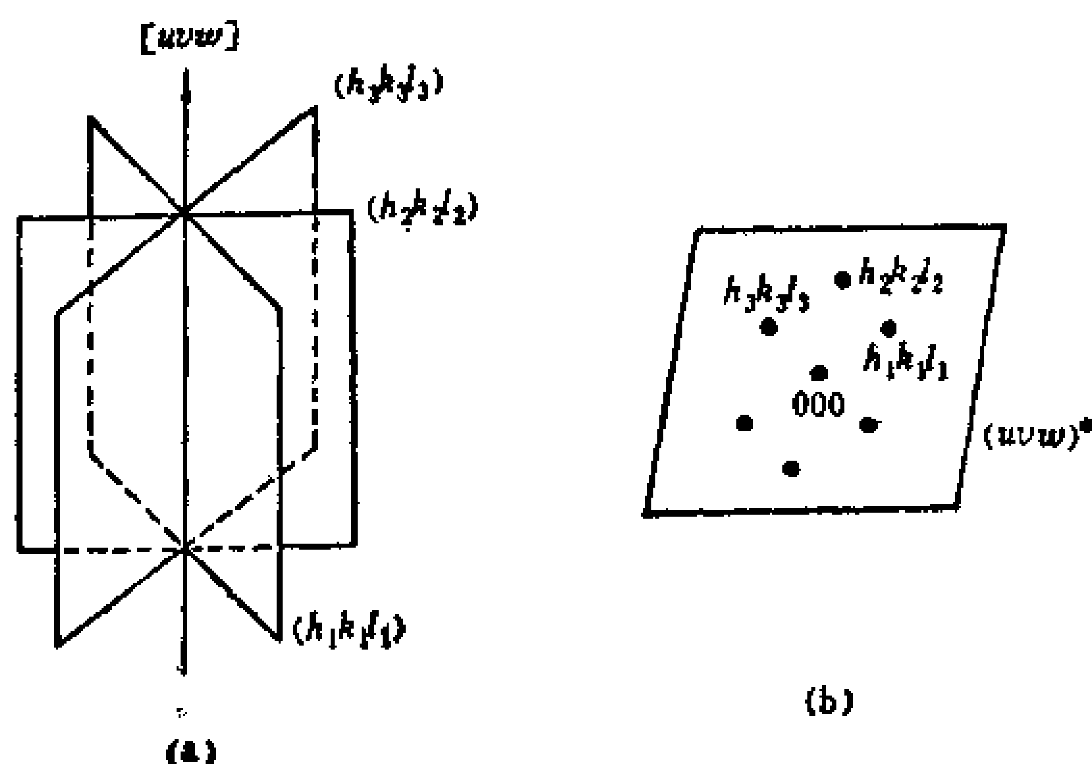


图 9-5　晶带及其在倒易点阵中的位置

(a) 正点阵中的晶带；(b) 晶带在倒易点阵中的相应位置

（二）晶带方程

由于晶带轴 $[uvw]$ 与晶带面 (hkl) 的倒易矢量存在着 $[uvw] \perp [hkl]^*$ 关系，即有：

$$r_{uvw} \cdot g_{hkl} = 0$$

然而上式可以写成：

$$(u\boldsymbol{a} + v\boldsymbol{b} + w\boldsymbol{c}) \cdot (h\boldsymbol{a}^* + k\boldsymbol{b}^* + l\boldsymbol{c}^*) = 0$$

将上式展开，获得：

$$hu + kv + lw = 0 \tag{9-12}$$

这就是前面谈到的晶带方程。晶带方程是某晶面 (hkl) 是否属于某晶带 [uvw] 的判据。

倒易点阵中的面 $(uvw)^*$ 也是一个面列，如图 9-6 所示。$(uvw)^*$面列中过原点的面为零阶面，记为 $N = 0$；往正、负[uvw]方向分别有正、负一、二阶面等，记为 $N = \pm 1, \pm 2, \cdots, N$ 为倒易面的阶数。倒易面 $(uvw)^*$的面间距为 $d^*_{uvw} = 1/r_{uvw}$。

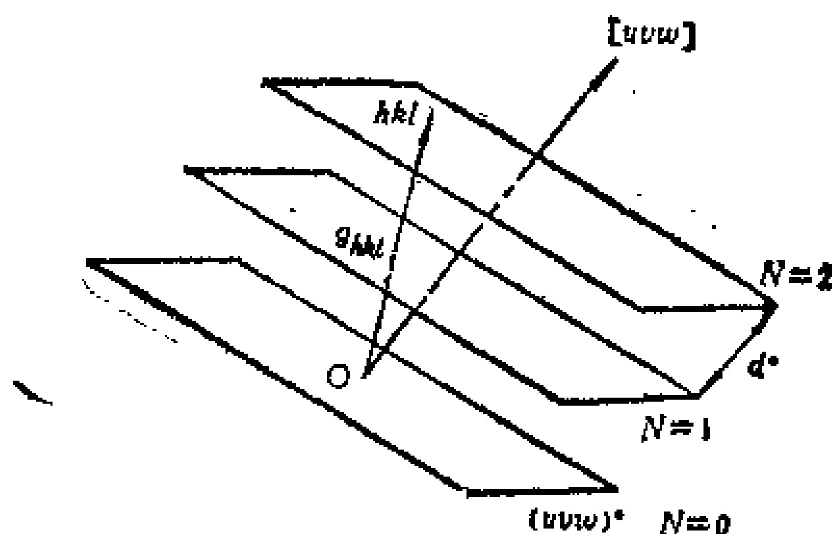


图 9-6 倒易面列 $(uvw)^*$与广义晶带，N 为倒易面的阶数，d^*为倒易面的面间距，hkl 为广义晶带中的某结点，[uvw]为晶带，$[uvw] \perp (uvw)^*$

零阶 $(uvw)^*$面代表正点阵中的一个晶带。现在，我们认为倒易面列 $(uvw)^*$都代表 [uvw] 晶带，称此时的晶带为广义晶带。

广义晶带仅在倒易点阵中才有明确的意义。在N阶倒易面上有倒易结点 hkl，则必有：

$$\boldsymbol{g}_{hkl} \cdot \frac{\boldsymbol{r}_{uvw}}{r_{uvw}} = Nd^*_{uvw}$$

所以有：

$$hu + kv + lw = N \qquad (9\text{-}13)$$

(9-13)式表示的是广义晶带方程，(9-12)式只是它的特殊情况。

如果已知两个晶面 $(h_1k_1l_1)$ 和 $(h_2k_2l_2)$，可以利用晶带方程求出其带轴的指数 $[uvw]$。根据：

$$h_1u + k_1v + l_1w = 0$$

$$h_2u + k_2v + l_2w = 0$$

可以解出 $[uvw]$ 中三指数之比为：

$$u:v:w = \begin{vmatrix} k_1 & l_1 \\ k_2 & l_2 \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} l_1 & h_1 \\ l_2 & h_2 \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} h_1 & k_1 \\ h_2 & k_2 \end{vmatrix}$$

便于记忆的形式为：

$$\begin{array}{c|cccc|c} h_1 & k_1 & l_1 & h_1 & k_1 & l_1 \\ & \searrow\swarrow & \searrow\swarrow & \searrow\swarrow & & \\ h_2 & k_2 & l_2 & h_2 & k_2 & l_2 \\ & \multicolumn{2}{c}{\underbrace{\quad}_{u}} & \underbrace{\quad}_{v} & \underbrace{\quad}_{w} & \end{array}$$

其中"↘"项 $(k_1l_2,\cdots)$ 的符号为正，"↙"项 $(l_1k_2,\cdots)$的符号为负。例如$(\bar{1}02)$与$(\bar{3}42)$面的交线，即带轴的求法为

$$\begin{array}{c|cccc|c} \bar{1} & 0 & 2 & \bar{1} & 0 & 2 \\ & \searrow\swarrow & \searrow\swarrow & \searrow\swarrow & & \\ \bar{3} & 4 & 2 & \bar{3} & 4 & 2 \end{array}$$

于是 $u = \bar{8}$，$v = \bar{4}$，$w = \bar{4}$。所以带轴的指数为$[\bar{2}\bar{1}\bar{1}]$。

四、主要晶体学关系的计算

（一）晶面法线的计算

正点阵中的晶面 (hkl) 与其法线 $[uvw]$ 一般并不同名，然而它总与其倒易点阵中的同名矢量 $[hkl]^*$ 垂直。既然 $[uvw]$ 和 $[hkl]^*$ 是同一晶面法线在两个坐标系中的表达，所以在不考虑矢

量的绝对长度时有 $\boldsymbol{g}_{hkl}=\boldsymbol{r}_{uvw}$,即

$$h\boldsymbol{a}^*+k\boldsymbol{b}^*+l\boldsymbol{c}^*=u\boldsymbol{a}+v\boldsymbol{b}+w\boldsymbol{c} \tag{9-14}$$

将上式两边点乘 $\boldsymbol{a}^*$,有:

$$u=\boldsymbol{a}^*\cdot\boldsymbol{a}^*h+\boldsymbol{a}^*\cdot\boldsymbol{b}^*k+\boldsymbol{a}^*\cdot\boldsymbol{c}^*l$$

两边分别点乘 $\boldsymbol{b}^*$或 $\boldsymbol{c}^*$得:

$$v=\boldsymbol{b}^*\cdot\boldsymbol{a}^*h+\boldsymbol{b}^*\cdot\boldsymbol{b}^*\cdot k+\boldsymbol{b}^*\cdot\boldsymbol{c}^*l$$

$$w=\boldsymbol{c}^*\cdot\boldsymbol{a}^*h+\boldsymbol{c}^*\cdot\boldsymbol{b}^*k+\boldsymbol{c}^*\cdot\boldsymbol{c}^*l$$

上述三个式子可以写成矩阵形式:

$$\begin{bmatrix}u\\v\\w\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{a}^*\cdot\boldsymbol{a}^* & \boldsymbol{a}^*\cdot\boldsymbol{b}^* & \boldsymbol{a}^*\cdot\boldsymbol{c}^*\\\boldsymbol{b}^*\cdot\boldsymbol{a}^* & \boldsymbol{b}^*\cdot\boldsymbol{b}^* & \boldsymbol{b}^*\cdot\boldsymbol{c}^*\\\boldsymbol{c}^*\cdot\boldsymbol{a}^* & \boldsymbol{c}^*\cdot\boldsymbol{b}^* & \boldsymbol{c}^*\cdot\boldsymbol{c}^*\end{bmatrix}\begin{bmatrix}h\\k\\l\end{bmatrix} \tag{9-15}$$

上式说明,如果某晶面 (hkl) 的指数为已知,要想得知其晶面法线指数 $[uvw]$,必须已知其倒易点阵的基矢 $\boldsymbol{a}^*$、$\boldsymbol{b}^*$、$\boldsymbol{c}^*$。

与此相同,如果已知正点阵中某一方向 $[uvw]$ 的指数,要想求得与其垂直的晶面 (hkl) 时,可以将(9-14) 式两边分别点乘 $\boldsymbol{a}$、$\boldsymbol{b}$、$\boldsymbol{c}$,从而有:

$$h=u\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{a}+v\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}+w\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{c}$$

$$k=u\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}+v\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{b}+w\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{c}$$

$$l=u\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{c}+v\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{c}+w\boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{c}$$

写成矩阵形式是:

$$\begin{bmatrix}h\\k\\l\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{a} & \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b} & \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{c}\\\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{a} & \boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{b} & \boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{c}\\\boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{a} & \boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{b} & \boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{c}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}u\\v\\w\end{bmatrix} \tag{9-16}$$

(9-15)、(9-16)式适用于所有的晶系,记以:

$$[G]=\begin{bmatrix}\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{a} & \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b} & \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{c}\\\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{a} & \boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{b} & \boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{c}\\\boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{a} & \boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{b} & \boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{c}\end{bmatrix} \tag{9-17}$$

$$[G^*] = \begin{bmatrix} \boldsymbol{a}^* \cdot \boldsymbol{a}^* & \boldsymbol{a}^* \cdot \boldsymbol{b}^* & \boldsymbol{a}^* \cdot \boldsymbol{c}^* \\ \boldsymbol{b}^* \cdot \boldsymbol{a}^* & \boldsymbol{b}^* \cdot \boldsymbol{b}^* & \boldsymbol{b}^* \cdot \boldsymbol{c}^* \\ \boldsymbol{c}^* \cdot \boldsymbol{a}^* & \boldsymbol{c}^* \cdot \boldsymbol{b}^* & \boldsymbol{c}^* \cdot \boldsymbol{c}^* \end{bmatrix} \tag{9-18}$$

$[G]$与$[G^*]$为晶面指数与其法线指数之间的转换矩阵。

例 1. 立方晶系的晶面指数与其法线指数

立方晶系阵胞基矢群之间关系为：

$$\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{a} = \boldsymbol{b} \cdot \boldsymbol{b} = \boldsymbol{c} \cdot \boldsymbol{c} = a^2$$

$$\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} = \boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{c} = \cdots\cdots = 0$$

所以：

$$[G] = \begin{bmatrix} a^2 & 0 & 0 \\ 0 & a^2 & 0 \\ 0 & 0 & a^2 \end{bmatrix}$$

其倒易单胞基矢群间的关系为：

$$\boldsymbol{a}^* \cdot \boldsymbol{a}^* = \boldsymbol{b}^* \cdot \boldsymbol{b}^* = \boldsymbol{c}^* \cdot \boldsymbol{c}^* = \frac{1}{a^2}$$

$$\boldsymbol{a}^* \cdot \boldsymbol{b}^* = \boldsymbol{a}^* \cdot \boldsymbol{c}^* = \cdots\cdots 0$$

故有：

$$[G^*] = \begin{bmatrix} \frac{1}{a^2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{a^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{a^2} \end{bmatrix}$$

晶面 (hkl) 与它的法线 $[uvw]$ 之间有：

$$\begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} = [G^*] \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix} = \frac{1}{a^2} \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}$$

于是，对于立方晶系来说，晶面指数与其法线的方向指数同名，即

(111)面的法线为[111]方向,(123)面的法线为[123]方向等。

例 2. 六方晶系的晶面指数与其法线指数

图 9-7 给出六方晶系中正、倒点阵的基矢群 $\boldsymbol{a}$、$\boldsymbol{b}$、$\boldsymbol{c}$ 和 $\boldsymbol{a}^*$、$\boldsymbol{b}^*$、$\boldsymbol{c}^*$. 对于正点阵,三基矢之间的关系为:

$$\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{a}=\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{b}=a^2,\ \boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{c}=c^2$$

$$\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}=a^2\cos120^\circ=-\frac{1}{2}a^2$$

$$\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{c}=\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{c}=0$$

故有

$$[G]=\begin{bmatrix} a^2 & -\frac{a^2}{2} & 0 \\ -\frac{a^2}{2} & a^2 & 0 \\ 0 & 0 & c^2 \end{bmatrix}$$

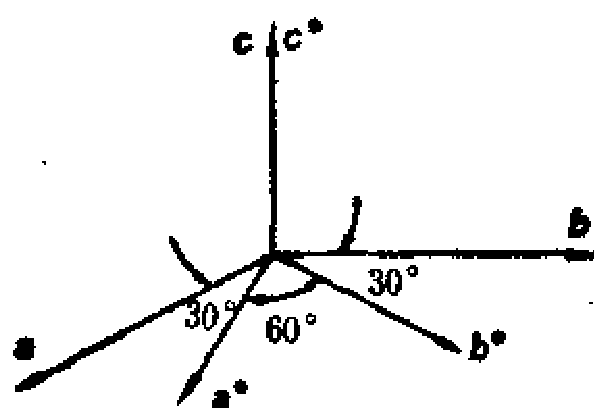


图 9-7 六方晶系中正、倒点阵的三基矢 $\boldsymbol{a}$、$\boldsymbol{b}$、$\boldsymbol{c}$ 和 $\boldsymbol{a}^*$、$\boldsymbol{b}^*$、$\boldsymbol{c}^*$之间的关系

对于倒易点阵,三基矢之间的关系为:

$$\boldsymbol{a}^*\cdot\boldsymbol{a}^*=\boldsymbol{b}^*\cdot\boldsymbol{b}^*=\left|\frac{\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c}}{\boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c})}\right|^2$$

$$= \left(\frac{bc\sin 90°}{abc\sin 90°\cos 30°}\right)^2$$

$$= \frac{4}{3a^2}$$

$$\boldsymbol{a}^* \cdot \boldsymbol{b}^* = \left[\frac{\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c}}{\boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c})}\right]\cdot\left[\frac{\boldsymbol{c}\times\boldsymbol{a}}{\boldsymbol{b}\cdot(\boldsymbol{c}\times\boldsymbol{a})}\right]$$

$$= \left(\frac{bc}{abc\cos 30°}\right)^2 \cos 60°$$

$$= \frac{2}{3a^2}$$

$$\boldsymbol{a}^* \cdot \boldsymbol{c}^* = \boldsymbol{b}^* \cdot \boldsymbol{c} = 0$$

$$\boldsymbol{c}^* \cdot \boldsymbol{c}^* = \left(\frac{ab}{abc}\right)^2 = \frac{1}{c^2}$$

故有：

$$[G^*] = \begin{bmatrix} \frac{4}{3a^2} & \frac{2}{3a^2} & 0 \\ \frac{2}{3a^2} & \frac{4}{3a^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{c^2} \end{bmatrix}$$

于是，在三轴系中 (hkl) 面的法线 $[UVW]$ 是：

$$\begin{bmatrix} U \\ V \\ W \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{4}{3a^2} & \frac{2}{3a^2} & 0 \\ \frac{2}{3a^2} & \frac{4}{3a^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{c^2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}$$

即：

$$U = \frac{2}{3a^2}(2h + k)$$

$$V = \frac{2}{3a^2}(h + 2k)$$

$$W = \frac{1}{c^2} l$$

也就是说，在三指数系统中，(hkl) 面的法线是$\left[2h + k \quad h + 2k \quad \frac{3a^2}{2c^2} l\right]$。而与 $[UVW]$ 方向相垂直的面 (hkl) 指数是：

$$\begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a^2 & -\frac{a^2}{2} & 0 \\ -\frac{a^2}{2} & a^2 & 0 \\ 0 & 0 & c^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U \\ V \\ W \end{bmatrix}$$

从而有：

$$h = \frac{a^2}{2}(2U - V)$$

$$k = \frac{a^2}{2}(2V - U)$$

$$l = c^2 W$$

也就是说与 $[UVW]$ 方向垂直的面指数为 $\left(2U - V \quad 2V - U \quad \frac{2c^2}{a^2} W\right)$。

如果以 a_1、a_2、a_3、c 四轴系表示方六晶系中的晶面与晶向，则 $(hkil)$ 与 $(uvtw)$ 之间有：

$$u = \frac{1}{3}(2U - V) = \frac{2}{3a^2} h$$

$$v = \frac{1}{3}(2V - U) = \frac{2}{3a^2} k$$

$$w = \frac{1}{c^2} l$$

或者：

$$h = \frac{a^2}{2}(2U - V) = \frac{3a^2}{2}u$$

$$k = \frac{3a^2}{2}v$$

$$l = c^2 w$$

也就是说晶面（$hkil$）的法向为$\left[hki\frac{3a^2}{2c^2}l\right]$，晶向$[uvtw]$的垂直平面为$\left(uvt\frac{2c^2}{3a^2}w\right)$。这些关系表示出，在讨论晶面与其法向指数时用四指数表达，比用三指数表达简单。

（二）晶面距的计算

任意晶系的晶面距 d 与晶面指数（hkl）和点阵参数 a、b、c、α、β、γ 之间的关系，可利用正、倒点阵的倒易关系

$d_{hkl} = \frac{1}{|g_{hkl}|}$ 求出：

$$\begin{aligned} g \cdot g = \frac{1}{d^2} &= (ha^* + kb^* + lc^*) \cdot (ha^* + kb^* + lc^*) \\ &= h^2 a^{*2} + k^2 b^{*2} + l^2 c^{*2} + 2hka^* \cdot b^* \\ &\quad + 2klb^* \cdot c^* + 2lhc^* \cdot a^* \end{aligned} \tag{9-19}$$

记 a^*, b^*, c^* 为 a_i^* 或 a_j^*，其中 $i, j = 1,2,3$；同样，记 h, k, l 为 h_i 或 h_j 则有

$$\frac{1}{d^2} = \sum\sum h_i h_j a_i^* \cdot a_j^* \tag{9-20}$$

利用上面导出的关系式可知立方晶系的晶面距公式为：

$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

六方晶系的晶面距公式为：

$$\frac{1}{d^2} = \frac{4}{3a^2}(h^2 + hk + k^2) + \frac{l^2}{c^2}$$

（三）两晶面之间夹角 ϕ 的计算

如果晶面（$h_1k_1l_1$）与（$h_2k_2l_2$）之间的夹角为 ϕ，则两晶面法线之间的夹角也为 ϕ，即 $\boldsymbol{g}_{h_1k_1l_1}$ 与 $\boldsymbol{g}_{h_2k_2l_2}$ 夹角为 ϕ。

$$\boldsymbol{g}_{h_1k_1l_1}\cdot\boldsymbol{g}_{h_2k_2l_2}=|\boldsymbol{g}_{h_1k_1l_1}||\boldsymbol{g}_{h_2k_2l_2}|\cos\phi$$

于是

$$\cos\phi=\frac{\boldsymbol{g}_1\cdot\boldsymbol{g}_2}{|\boldsymbol{g}_1||\boldsymbol{g}_2|}$$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{g}_1\cdot\boldsymbol{g}_2=&h_1h_2\boldsymbol{a}^{*2}+k_1k_2\boldsymbol{b}^{*2}+l_1l_2\boldsymbol{c}^{*2}+(h_1k_2+h_2k_1)\\&\boldsymbol{a}^*\cdot\boldsymbol{b}^*+(h_1l_2+h_2l_1)\boldsymbol{a}^*\cdot\boldsymbol{c}^*+(k_1l_2+k_2l_1)\boldsymbol{b}^*\cdot\boldsymbol{c}^*\end{aligned}$$

$$|\boldsymbol{g}_1|=\frac{1}{d_1},\quad|\boldsymbol{g}_2|=\frac{1}{d_2}$$

因此对于立方晶系有

$$\cos\phi=\frac{h_1h_2+k_1k_2+l_1l_2}{\sqrt{h_1^2+k_1^2+l_1^2}\sqrt{h_2^2+k_2^2+l_2^2}}$$

例如(100)与(110)面之间的夹角 $\phi=\arccos 1/\sqrt{2}=45°$；(100)与(111)面之间的夹角 $\phi=\arccos 1/\sqrt{3}=54.7°$。

对于六方晶系有

$$\begin{aligned}\cos\phi=&\left[h_1h_2+k_1k_2+0.5(h_1k_2+h_2k_1)+\frac{3a^2}{4c^2}l_1l_2\right]\Big/\left\{\left[h_1^2\right.\right.\\&\left.+k_1^2+h_1k_1+\left(\frac{3a^2}{4c^2}\right)l_1^2\right]^{\frac{1}{2}}\left[h_2^2+k_2^2\right.\\&\left.\left.+h_2k_2+\left(\frac{3a^2}{4c^2}\right)l_2^2\right]^{\frac{1}{2}}\right\}\end{aligned}$$

例如(100)与(210)面之间的夹角 $\phi=\arccos 2.5/\sqrt{7}=19.11°$

（四）晶面（hkl）的法线与某方向 [uvw] 之间的夹角 η

晶面（hkl）法线由倒易矢 $\boldsymbol{g}$ 描述：

$$\boldsymbol{g} = h\boldsymbol{a}^* + k\boldsymbol{b}^* + l\boldsymbol{c}^*$$

方向 $[uvw]$ 由平移矢 $\boldsymbol{r}$ 描述:

$$\boldsymbol{r} = u\boldsymbol{a} + v\boldsymbol{b} + w\boldsymbol{c}$$

两者的夹角为 η,有: $\boldsymbol{g} \cdot \boldsymbol{r} = |\boldsymbol{g}||\boldsymbol{r}|\cos\eta$

$$\cos\eta = \frac{\boldsymbol{g} \cdot \boldsymbol{r}}{|\boldsymbol{g}||\boldsymbol{r}|}$$

其中 $\boldsymbol{g} \cdot \boldsymbol{r} = hu + kv + lw$

$$|\boldsymbol{r}| = \sqrt{\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{r}} = (u^2a^2 + v^2b^2 + w^2c^2 + 2uv\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} + 2uw\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{c} + 2vw\boldsymbol{b} \cdot \boldsymbol{c})^{\frac{1}{2}}$$

$$|\boldsymbol{g}| = (h^2a^{2*} + k^2b^{*2} + l^2c^{2*} + 2hk\boldsymbol{a}^* \cdot \boldsymbol{b}^* + 2hl\boldsymbol{a}^* \cdot \boldsymbol{c}^* + 2kl\boldsymbol{b}^* \cdot \boldsymbol{c}^*)^{\frac{1}{2}}$$

对于立方晶系,有:

$$|\boldsymbol{r}| = (u^2 + v^2 + w^2)^{\frac{1}{2}}a$$

$$|\boldsymbol{g}| = (h^2 + k^2 + l^2)^{\frac{1}{2}}\frac{1}{a}$$

即
$$\cos\eta = \frac{uh + vk + wl}{\sqrt{u^2 + v^2 + w^2}\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

(hkl) 面法线与 $[hkl]$ 方向之间的夹角为:

$$\eta = \cos^{-1}\left(\frac{h^2 + k^2 + l^2}{h^2 + k^2 + l^2}\right) = 0$$

因此,对于立方晶系,晶面法线与同名的方向一致。

而(110)面法线与[100]方向之间的夹角为:

$$\eta = \cos^{-1}(1/\sqrt{2}) = 45°$$

对于六方晶系,有

$$|\boldsymbol{r}| = [(u^2 - uv + v^2)a^2 + w^2c^2]^{\frac{1}{2}}$$

$$|\boldsymbol{g}| = \left[\frac{4}{3a^2}(h^2 + hk + k^2) + \frac{l^2}{c^2}\right]^{\frac{1}{2}}$$

所以在六方晶系中,晶面法线的指数不同于晶面指数。

五、加权倒易点阵与倒易空间

前面讨论的倒易点阵，是由正点阵推演而来，它与正点阵一样，点阵中的结点都是几何点。但当我们考虑到晶体结构与晶体形状对倒易结点的影响时，情况就要发生变化，因为晶体结构要影响倒易结点的强弱，晶体形状和状态要影响倒易结点的形状。所谓加权倒易点阵就是为各个倒易结点加上晶体结构所产生的权重，而倒易空间是指由于晶体状态致使倒易结点变成各种形体的倒易点阵。

（一）加权倒易点阵

倒易空间中代表晶体结构特征的函数是结构因数，记为F.结构因数是倒易结点位置hkl、晶体中原子组成和位置uvw的函数，用原子散射因数f表示原子组成的影响。

$$F=\sum_{p}^{q}\left[\sum_{j}^{m} f_{jp}e^{i2\pi(u_{jp}h+v_{jp}k+w_{jp}l)}\right]e^{i2\pi(u_ph+v_pk+w_pl)} \quad (9\text{-}21)$$

其中 u_p、v_p、w_p 为晶体点阵中第p个结点的坐标，u_{jp}、v_{jp}、w_{jp} 为相应于p结点的结构单元中第j个原子的坐标，hkl 为倒易结点坐标，f_{jp} 为相应于p结点的结构单元中第j个原子的原子散射因数。加权利倒易点阵，就是以$|F|^2$之值表示各个倒易结点强弱时的倒易点阵。

下面我们讨论几种典型晶体结构的加权倒易点阵。

1. 体心晶胞的倒易阵胞

如果体心晶胞中仅包含两个原子，也就是每个结点与一个原子相对应，则结点坐标就是原子坐标。

此时(9-21)式可以简化成：

$$F = \sum_{p=1}^{2} f_p e^{i2\pi(u_p h + v_p k + w_p l)}$$

代入结点坐标 000，$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$ 后，得到

$$F = f_p[1 + e^{i\pi(h+k+l)}]$$

$$= \begin{cases} 2f_p & h+k+l \text{ 为偶数时} \\ 0 & h+k+l \text{ 为奇数时} \end{cases}$$

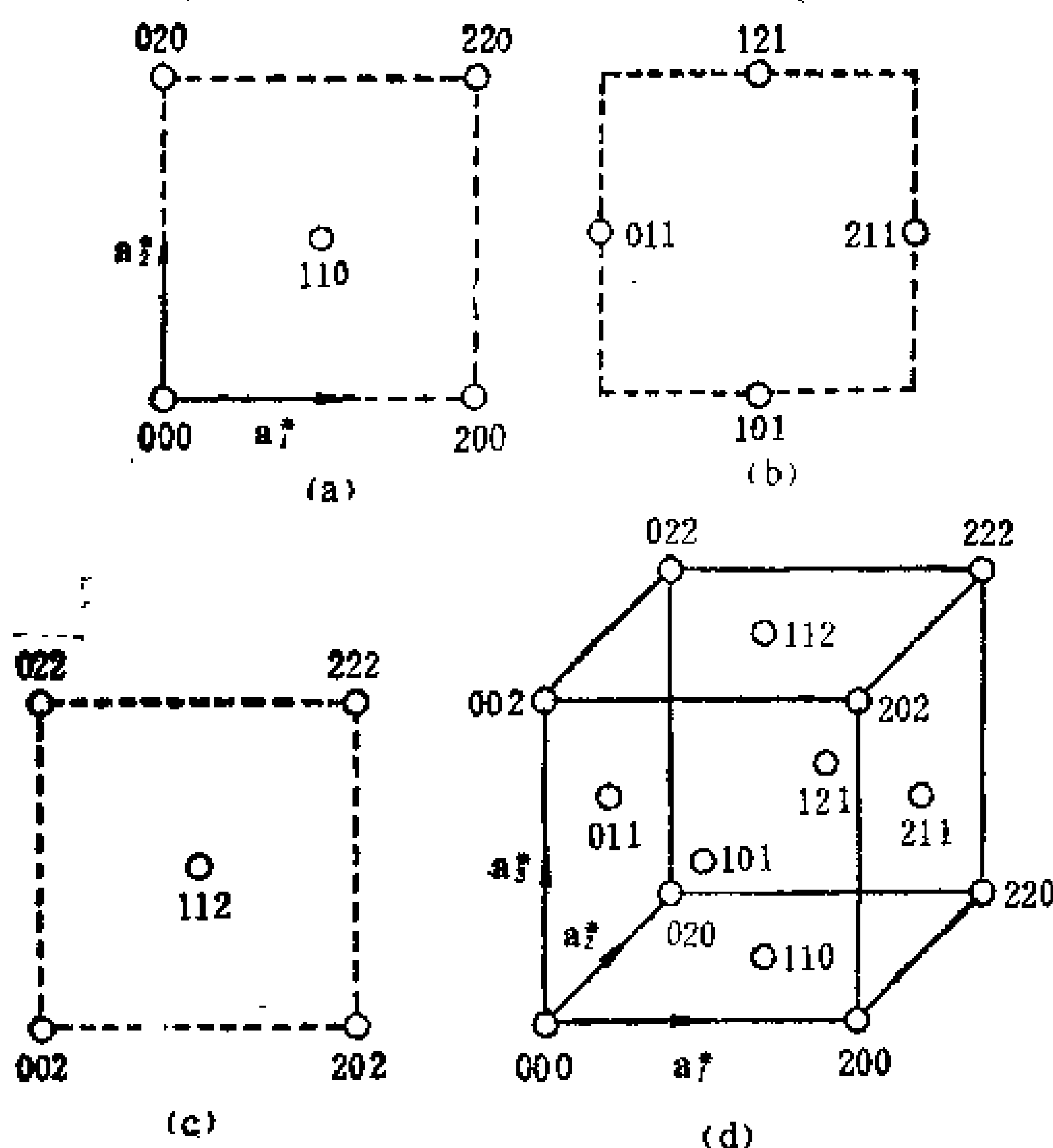


图9-8　体心立方晶胞的加权倒易点阵，(a)、(b)、(c) 分别为 c^* 为 0、1、2 层面上的结点分布，(d)为加权倒易阵胞

也就是说，对于像 Li、Na、K、Rb、Cs、Ba、V、Nb、Ta、Cr、Mo、W、α-Fe、Eu 等具有体心立方晶胞的金属，它们的倒易点阵中，$h+k+l$ 为奇数的倒易结点权重为零，因此这种结点在加权倒易点阵中消失了；其他倒易结点的权重都相等，即强弱相同。于是，这些体心立方晶胞的倒易点阵阵胞为面心立方点阵。由图 9-8 所示。而这时阵胞的棱长为 $2a^*$，体积 V^* 为 $8v^*$。此处 a^* 与 v^* 分别为按 (9-3) 和 (9-7) 式计算之值。图 9-8(a)、(b)、(c) 分别给出 c^* 为 0、1、2 时的层面上的结点分布，(d) 为加权倒易阵胞。

2. 面心晶胞的倒易阵胞

对于一个结点仅对应一个原子的面心晶胞，例如 Ca、Sr、Rh、Ir、Ni、Pd、Pt、Cu、Ag、Au、Al、Pb、Ce、Yb、Ac、Th 等具有面心立方晶胞，它们的结构因数为：

$$F=\sum_{p=1}^{4}\left[f_p e^{i2\pi(u_p h+v_p k+w_p l)}\right]$$

代入结点坐标 000、$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0$、$\frac{1}{2}0\frac{1}{2}$、$0\frac{1}{2}\frac{1}{2}$ 后，得：

$$F=f_p[1+e^{i\pi(h+k)}+e^{i\pi(h+l)}+e^{i\pi(k+l)}]$$
$$=\begin{cases}2f_p & h、k、l\ 同奇或同偶\\ 0 & h、k、l\ 奇、偶混合\end{cases}$$

于是，在倒易点阵中，指数奇、偶混合的结点消失了，它们的加权倒易点阵如图 9-9 所示，呈体心立方阵胞。

3. 密排六方晶胞的倒易阵胞

Be、Mg、Sc、Y、Ti、Zr、Hf、Tc、Re、Ru、Os、Co、Zn、Cd、Tl、La、Nd、Gd、Tb、Dy、Ho、Er、Tm、Lu、Am、Cm、Bk 都具有密排六方结构。从密排六方结构在(0001)面上的投影(图9-10)可以看出实际晶体是由虚线所示的平行六面体构成。图中“○”和“●”分别代表奇数层和偶数层上的原子位置。于是，由 a_1、a_2、c 构成的平行六面体代表了密排六方晶体的结构特征。因此，晶胞内仅有一个结点，

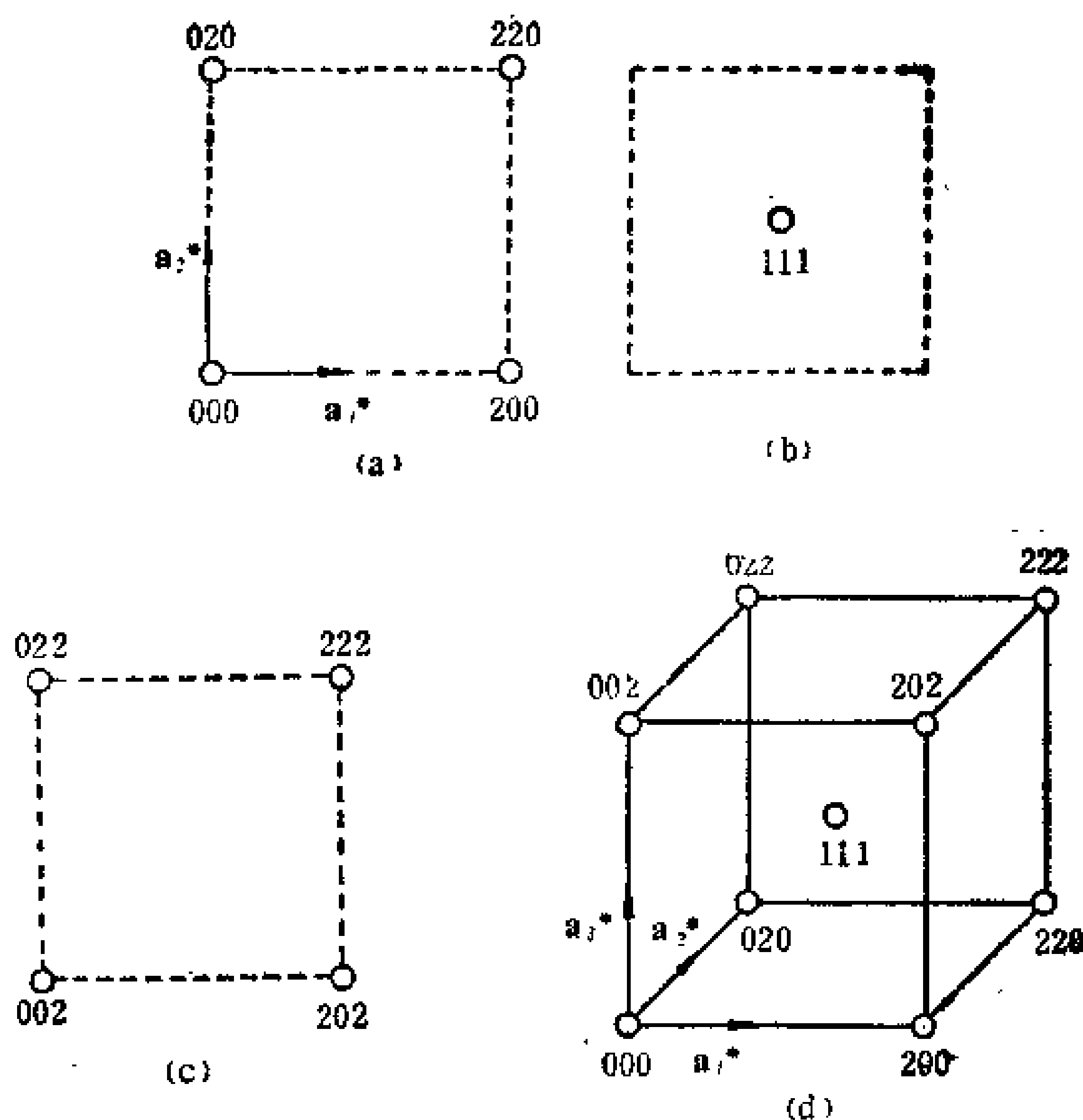


图 9-9 面心立方晶胞的加权倒易阵胞，(a)、(b)、(c) 分别为 c^*为 0、1、2 层时的结点分布，(d) 为加权倒易阵胞

相应此结点有两个原子，它们的坐标为 $000, \frac{2}{3}\frac{1}{3}\frac{1}{2}$。 结构因数为：

$$F = f[1 + e^{i2\pi(\frac{2}{3}h+\frac{1}{3}k+\frac{1}{2}l)}]$$

令 $\frac{2h+k}{3} + \frac{l}{2} = J$，有：

$$|F|^2 = f^2(1 + e^{i2\pi J})(1 + e^{-i2\pi J})$$

$$= 4f^2\cos^2\pi J$$

$$= 4f^2\cos^2\pi\left(\frac{2h+k}{3}+\frac{l}{2}\right)$$

从上式得出：

当 $2h+k=3m$，$l=2n+1$ 时，$F^2=0$；

$l=2n$ 时，$F^2=4f^2$；

当 $2h+k=3m\pm1$，$l=2n+1$ 时，$F^2=3f^2$；

$l=2n$ 时，$F^2=f^2$。

其中 m 和 n 都是整数。于是，在密排六方晶体的加权倒易点阵中，$2h+k$ 为 3 的倍数，l 为奇数的结点消失，其他指数的结点有强、弱之分。图 9-11 给出此加权倒易点阵中 c^* 为 0、1 层面上的结点分布，图中未表示出结点的强弱。图 9-12 为加权倒易点阵中的结点分布(a)和它的阵胞(b)。

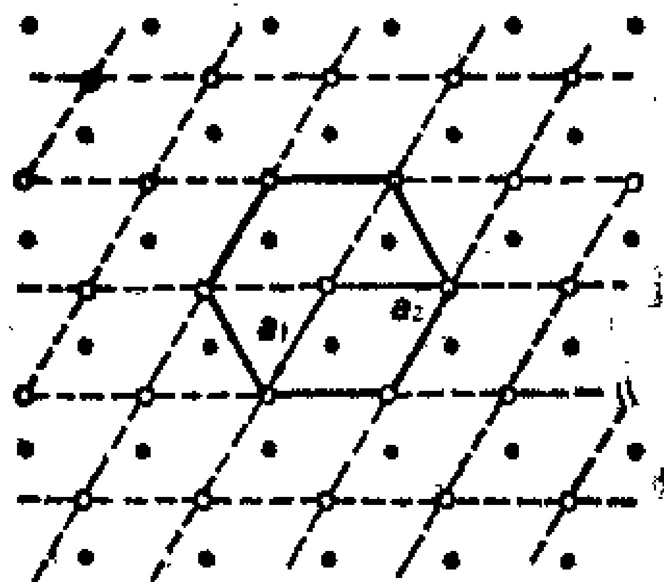


图 9-10　密排六方晶体结构在(0001)面上的投影，"○"与"●"分别代表在奇与偶数层面上的原子位置，图示表明整个晶体是由虚线所示的平行六面体构成

4. 底心晶胞的加权倒易阵胞

如果有如图 9-13 (a) 所示的底心晶胞，计算表明它的加权倒

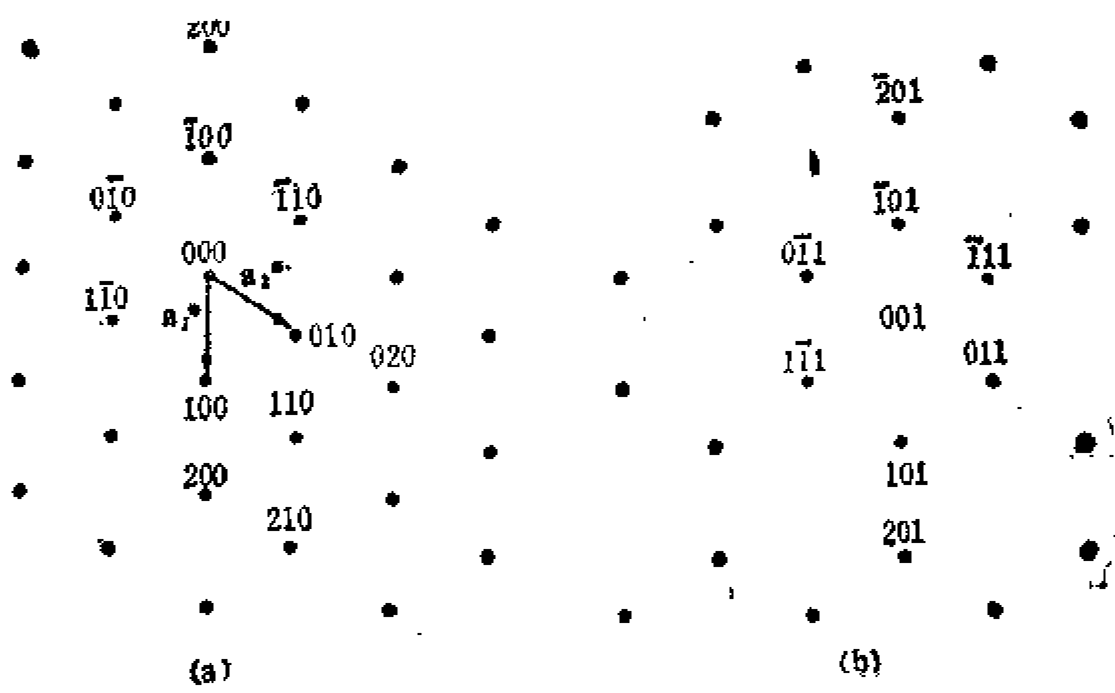


图 9-11 密排六方晶体的加权倒易点阵

(a) c^*为零面上的结点分布；(b) c^*为 1 面上的结点分布

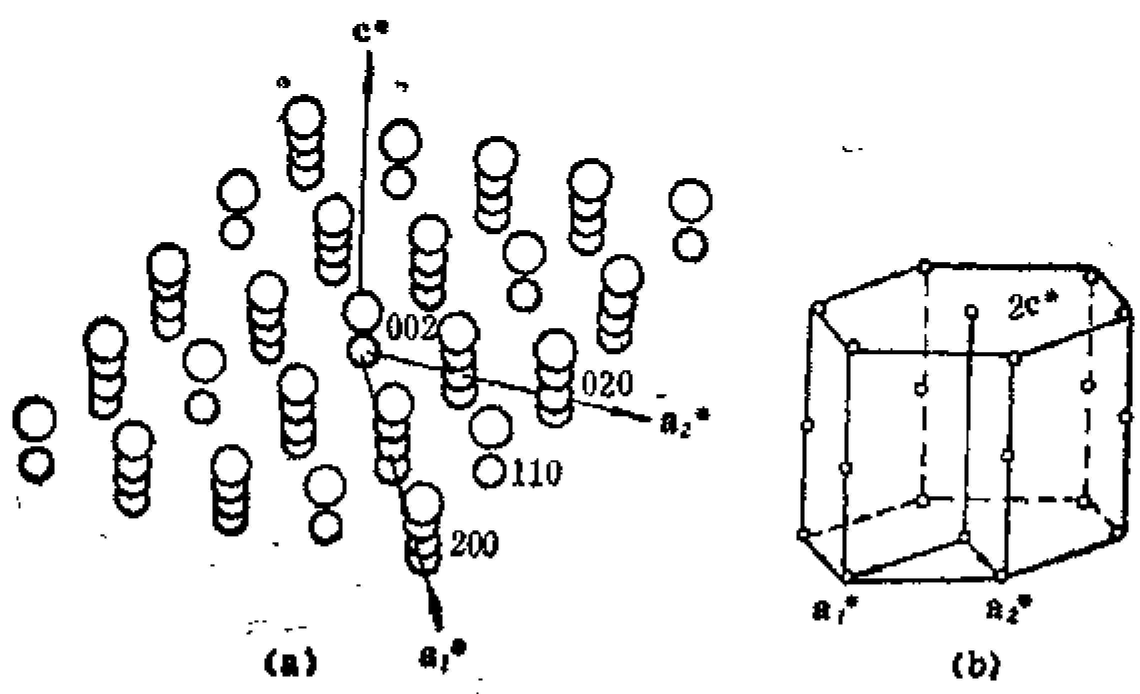


图 9-12 密排六方晶体的加权倒易点阵

(a)三维图形；(b)阵胞

易阵胞由图 9-13(b) 所示，加权倒易阵胞的体积 V^*为晶胞体积倒数的 4 倍，即 $V^* = 4/v$。

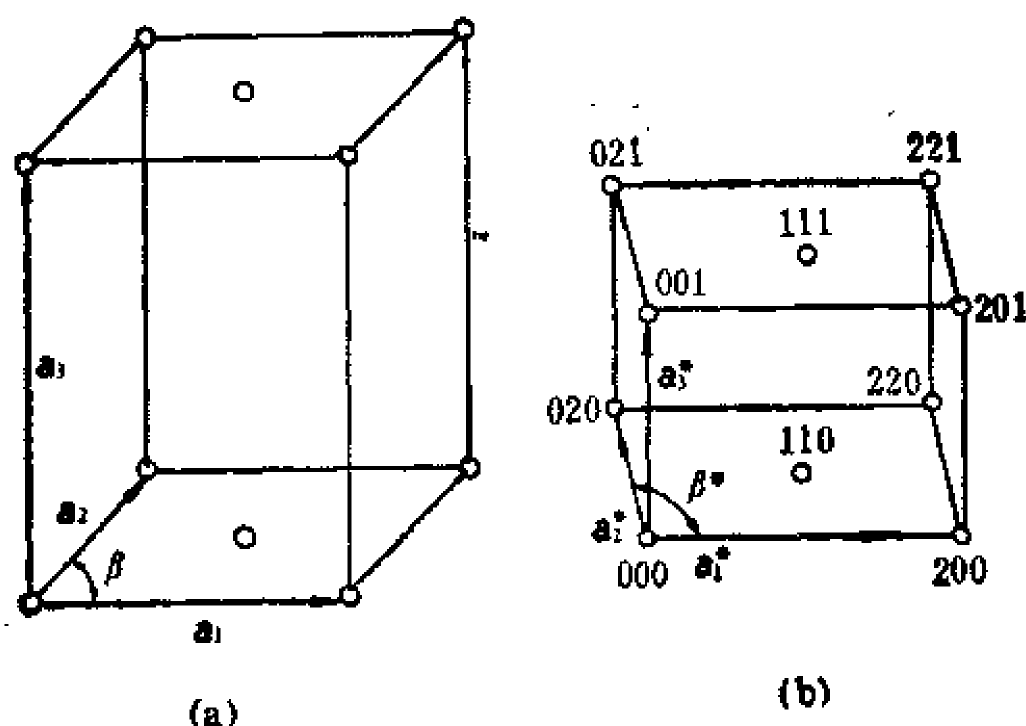


图 9-13　底心晶胞及其加权倒易点阵

(a)底心晶胞；(b)加权倒易点阵

5. CsCl 型结构的加权倒易阵胞

CsCl 结构由图 7-28 所示，晶胞内包含两个异类原子，位于 000，$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$ 处。计算表明，它的加权倒易阵胞由图 9-14 所示。在图 9-14 中，以结点处圆圈的大小来区别加权倒易结点的强弱。

6. 金刚石型结构的加权倒易阵胞

金刚石结构属面心立方点阵，即有 4 个结点，而每个结构单元包含 2 个原子，它们相对结点的坐标为 000，$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}$。于是，它们的结构因数 F 为：

$$F = f_c[1 + e^{i\pi/2(h+k+l)}][1 + e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(h+l)} + e^{i\pi(k+l)}]$$

记为：

$$F = f_c F_s F_t$$

于是有：

$$F^2 = f_c^2 F_s^2 F_t^2$$

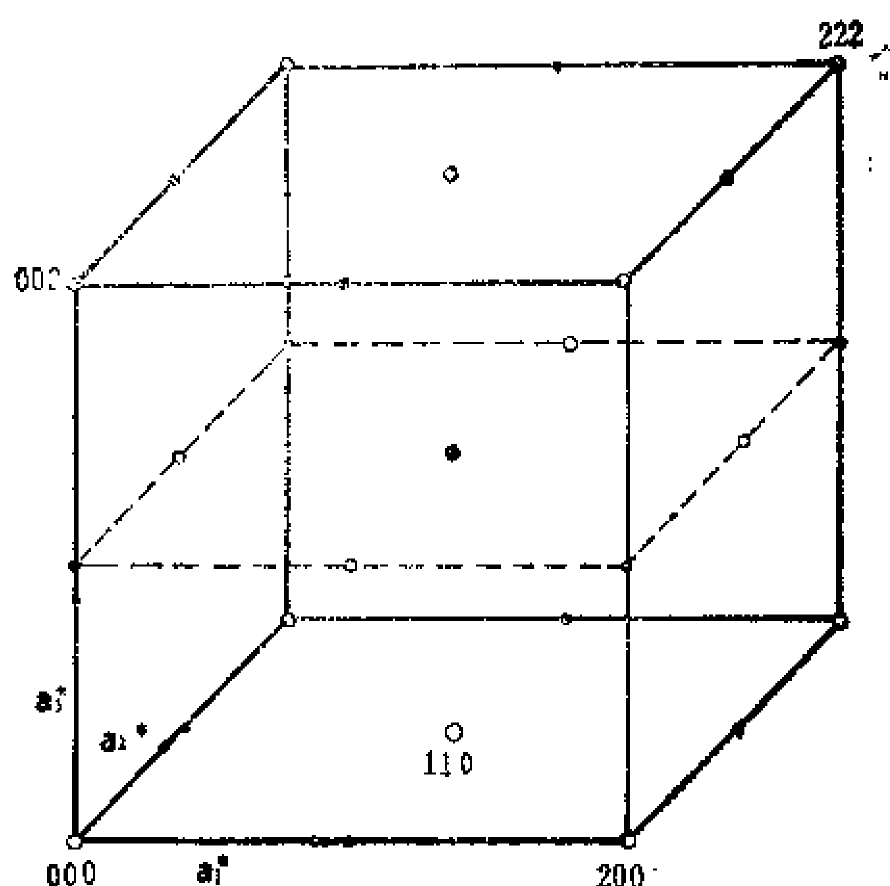


图 9-14　CsCl 结构的加权倒易阵胞

h、k、l 奇偶混杂的点使 F_f^2 为零，而 $1/2(h+k+l)$ 为奇数时使 F_f^2 为零．由于倒易结点指数同偶与同奇时 $e^{i\pi/2(h+k+l)}$ 之值不同，所以加权倒易点阵中的结点有强弱之分．

图 9-15 为金刚石晶胞的加权倒易点阵阵胞．

Si、Ge 具有金刚石结构．

7. CaF_2 型结构的加权倒易阵胞

CaF_2 型结构晶胞，图 7-27(c)，与金刚石晶胞相类似．同属面心立方点阵，只是对应一结点放置 3 个异类原子，一类原子位于结点上，坐标为 000，另一类原子有两个，坐标分别为 $\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}$ 和 $\frac{3}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}$．考察其结构因数中与 F_s 有关的部分为：

$$f_e F_s = f_1 + f_2[e^{i\pi/2(h+k+l)} + e^{i\pi/2(3h+k+l)}]$$

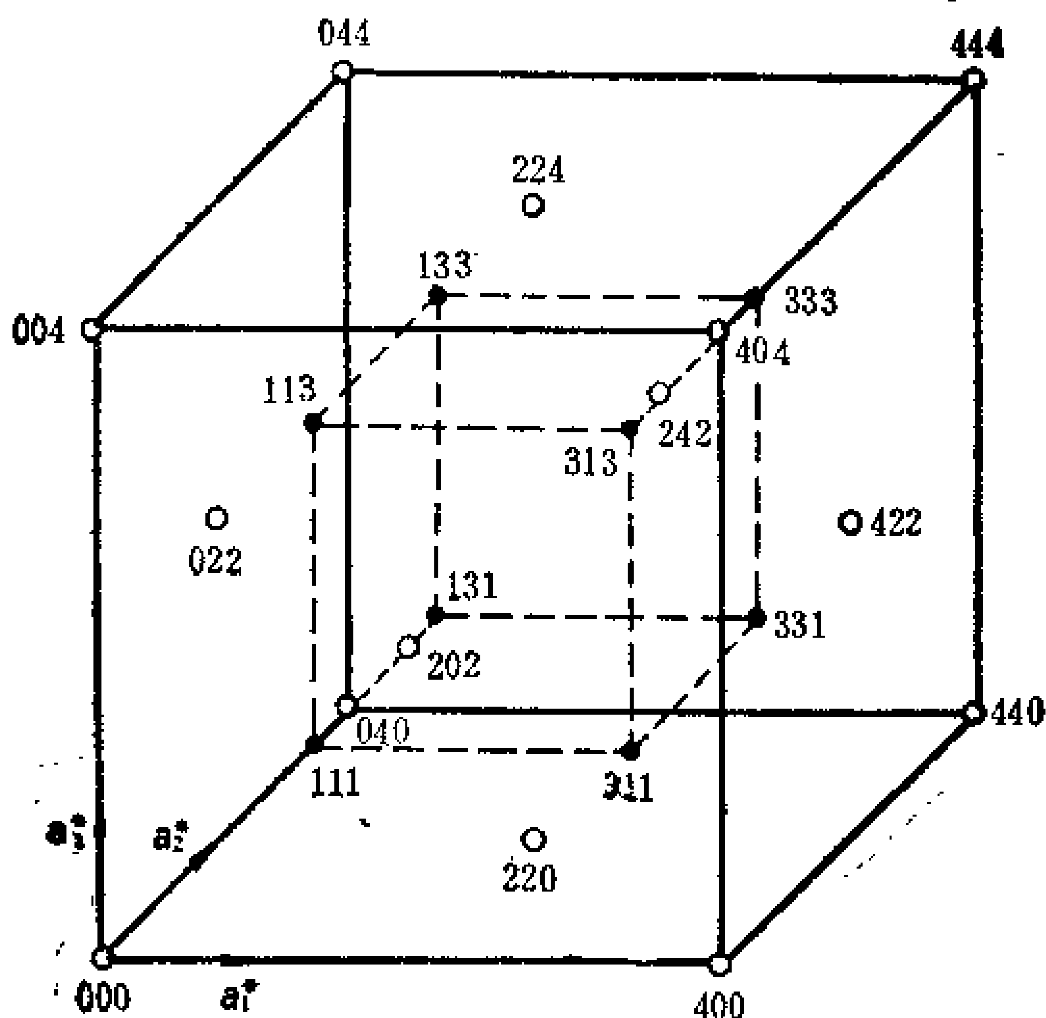


图 9-15 金刚石型结构的加权倒易点阵阵胞

所以它的加权倒易点阵阵胞与图 9-15 (b) 所示的相似，只是结点的强弱略有差别.

ThO_2、UO_2、CeO_2、BaF_2、PbF_2、SrF_2 具有 CaF_2 结构.

8. NaCl 型结构的加权倒易阵胞

NaCl 晶胞具有面心立方点阵，每个结构单元包含两个异类原子. NaCl 晶胞（图 1-21）中 Na 原子的坐标为 000，Cl 原子的坐标为 $\frac{1}{2}$ 00. 于是结构因数中与结构单元有关的部分 F_s 为:

$$fF_s = f_{Na} + f_{Cl}e^{i\pi h}$$

所以在 NaCl 的加权倒易点阵中，不仅 h、k、l 奇偶混合的倒易结点消失，而且由于 fF_s 的影响使 h 为奇或偶时的结构因数不同.

于是 NaCl 的加权倒易阵胞如图 9-16 所示。图中以结点的大小表示其强弱。

9. 晶胞中含两个原子时的加权倒易阵胞

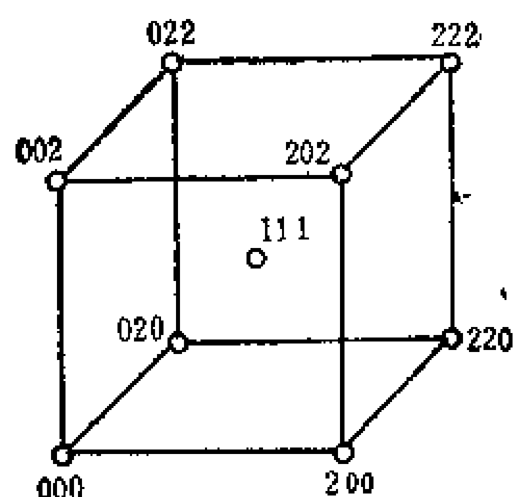


图 9-16　NaCl 晶胞的加权倒易阵胞

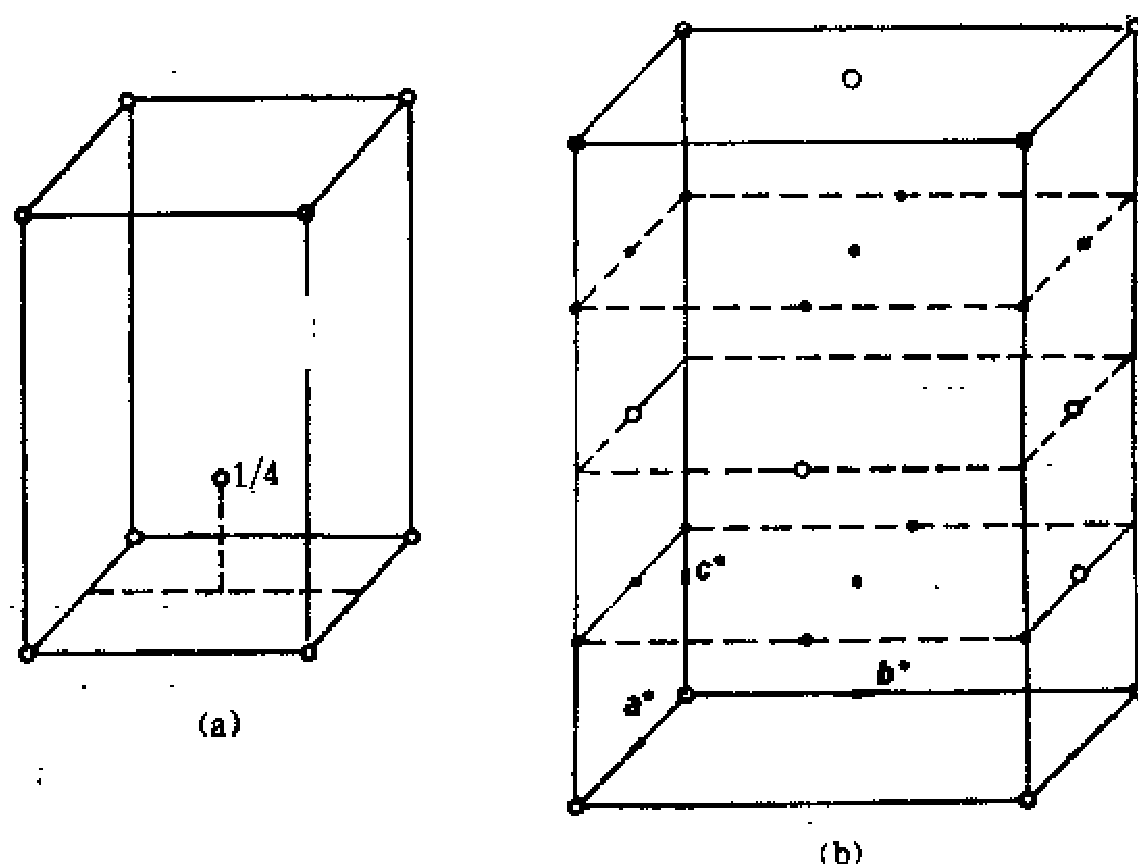


图 9-17　包含两个原子的晶胞及其加权倒易点阵

(a)包含两个原子的晶胞，原子位置 000，$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{4}$；(b)加权倒易点阵

如果晶胞内含两个原子，其坐标为 000，$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{4}$， 如图 9-17 (a)所示．则其结构因数为：

$$F^2 = f^2[1 + e^{i\pi(h+k)}e^{i\frac{\pi l}{2}}]^2$$

计算表明，该晶胞的加权倒易阵胞由图 9-17 (b) 所示。

（二）倒易空间

晶体形状对倒易结点的影响由干涉函数 L 描述。L 为：

$$L = \frac{\sin^2(\pi N_a s_1)}{\sin^2(\pi s_1)} \cdot \frac{\sin^2(\pi N_b s_2)}{\sin^2(\pi s_2)} \cdot \frac{\sin^2(\pi N_c s_3)}{\sin^2(\pi s_3)} \quad (9\text{-}22)$$

其中 N_a、N_b、N_c 分别为晶体在 $\boldsymbol{a}$、$\boldsymbol{b}$、$\boldsymbol{c}$ 三基矢方向上所含的晶胞数目，S_1、S_2、S_3 分别为沿该晶体倒易基矢 $\boldsymbol{a}^*$、$\boldsymbol{b}^*$、$\boldsymbol{c}^*$ 3个方向上的变量．干涉函数的有值[注]区，就是倒易结点的形体范畴，称它们

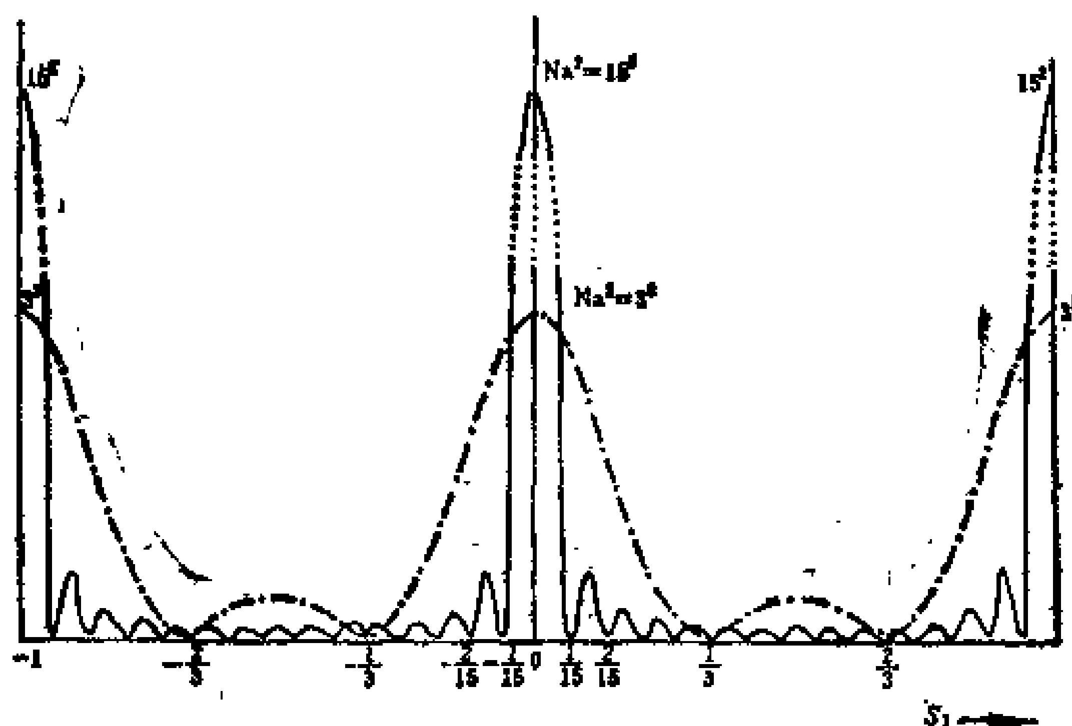


图 9-18　一维干涉函数的分布，细实线表示 $N_a = 15$ 时的情况；点画线表示 $N_a = 3$ 时的情况．最强峰的区域为主峰区，最大值在倒易结点处

注：干涉函数的有值区一般指干涉函数的最大峰值区间。

为倒易畴．在一般情况下，晶粒约 $1\mu^3$，这时，干涉函数 L 仅在倒易结点处才有值，于是倒易空间又演化为倒易点阵。

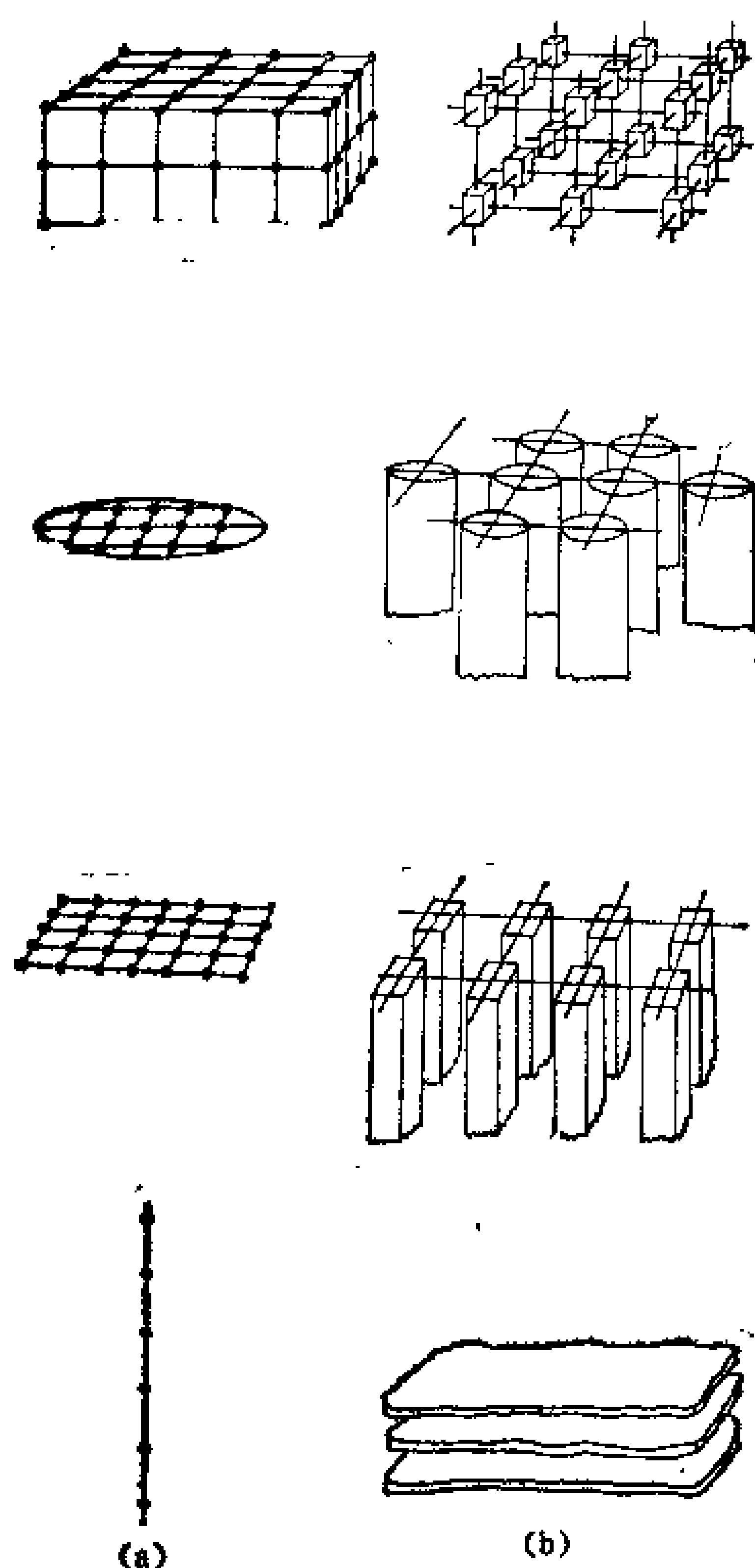


图 9-19　微晶形状与其对应的干涉函数主峰区形状
(a)微晶；(b)干涉函数的主峰区

为倒易畴．在一般情况下，晶粒约 $1\mu^3$，这时，干涉函数 L 仅在倒易结点处才有值，于是倒易空间又演化为倒易点阵。

图 9-18 给出 $N_a=3$ 和 15 时的干涉函数沿 a^* 方向上的分布. 在干涉函数图形中，最强峰所占的范围为主峰区. 主峰区的形状与晶体形状相关，例如它在 a^*、b^*、c^* 三个方向上的尺度为 $\pm\frac{1}{N_a}$, $\pm\frac{1}{N_b}$ 和 $\pm\frac{1}{N_c}$. 图 9-19 给出几种微晶形状 (a) 所对应的主峰区形状 (b). 长方体形微晶的干涉函数主峰区也为长方体形，只是微晶的长棱对应主峰区的短棱、微晶的短棱对应主峰区的长棱；二维微晶对应的主峰区呈杆状；有限长一维晶体则对应片层状主峰区. 也就是说，对应不同微晶形状，可以有倒易畴、倒易杆和倒易层片.

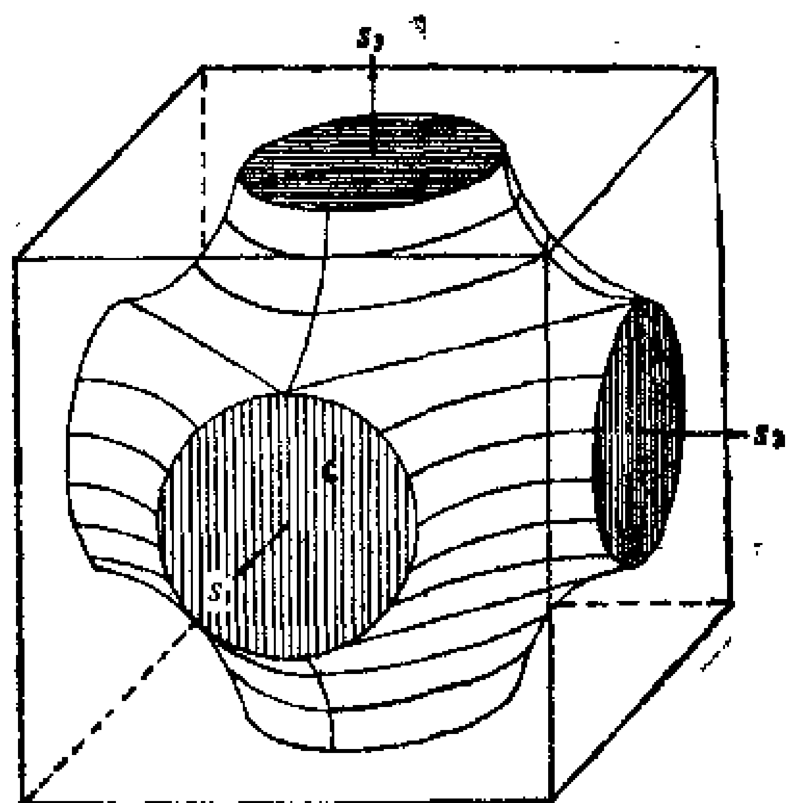


图 9-20 VC 立方形微晶相应的干涉函数主峰区内的等强度面，它构成沿 a^*、b^*、c^* 方向伸展的六角星芒

即使在主峰区内，干涉函数的值也相差很大，具体考虑到其值时，可以在主峰区内绘出等值线图. 图 9-20 为 VC 的立方形微晶所对应的主峰区内等强度面. VC 为 NaCl 结构. 等强度面构成

沿 a^*、b^*、c^* 伸展出去的六角星芒.

除晶体尺寸影响倒易畴的形状外，晶体的状态也引起倒易空间的变化。

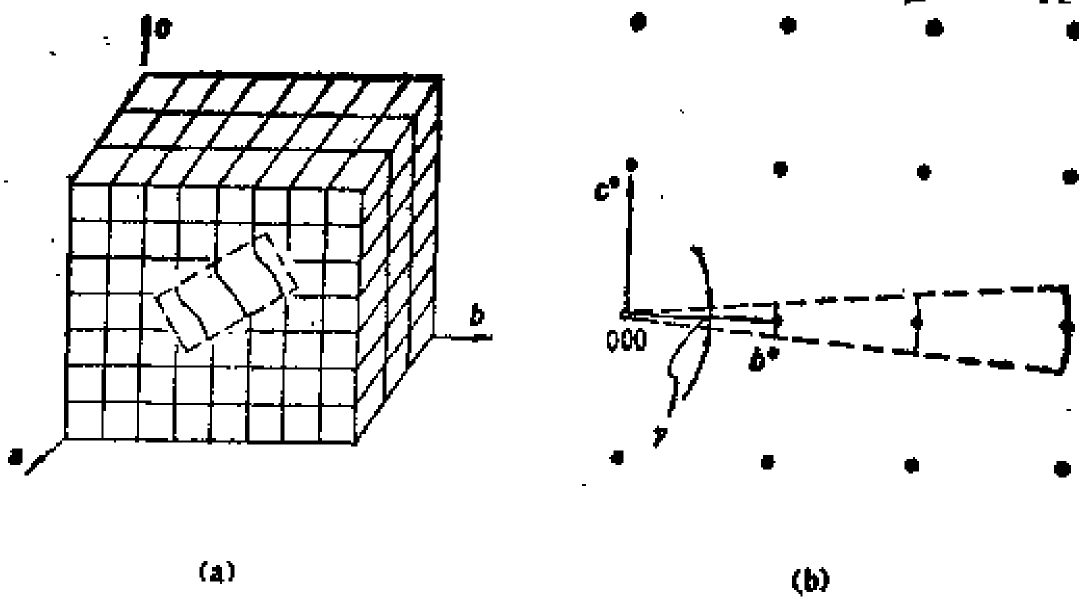


图 9-21　晶体弯曲引起倒易结点变化

(a)立方系晶体中(010)面的局部弯曲，弯曲的转轴为[100]；
(b)相应于晶面弯曲的倒易点阵变化

图 9-21(a) 所示的是某立方系晶体，晶体中由虚线所示的范围产生了晶面弯曲，即这部分晶体的 (010) 面绕[100]轴发生了局部转动。这种转动使得(010)面的取向发生了变化，而晶面的面间距并未改变。因此，相应的倒易结点变成一个与倒易原点成等间距的圆弧线，如图 9-21(b) 所示。圆弧线对倒易原点的张角 γ 由晶面转动的角度决定。如果晶面不是绕一个轴转动，则晶面弯曲可以使倒易结点变成一个圆弧面。圆弧线或圆弧面的尺度都与和原点的距离成正比。

如果立方系晶体在 c 轴方向受拉应力，则使得 (001) 面间距增大，(010)、(100)面间距都减小，如图 9-22(a) 所示。形象地说，沿 c 轴方向的单轴应力，使立方晶胞暂时变成了正方晶胞。于是，

其倒易点阵要发生相应的变化。图 9-22(b) 中"∘"代表一定拉应力时的倒易结点，"•"代表 $\sigma = 0$ 时的倒易结点。

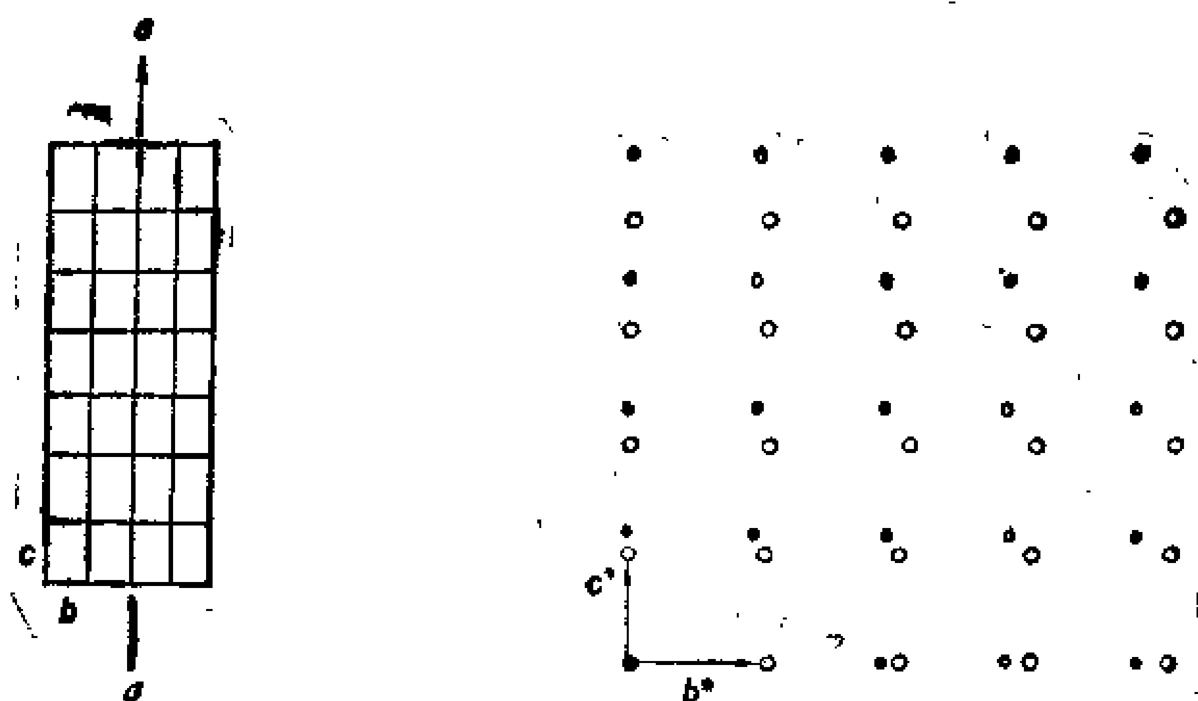


图 9-22 晶体变形时倒易点阵的变化

(a) 立方系晶体沿 c 方向受拉应力 σ 时的晶胞变形；(b) 相应于晶体变形的倒易点阵变化，"●"和"○"分别代表 $\sigma = 0$ 和取一定值时的倒易结点

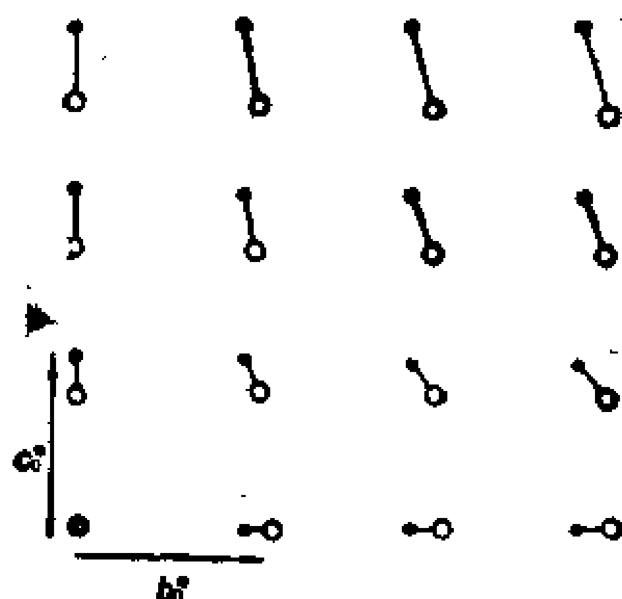


图 9-23 图 9-22(a) 中单轴应力大小不断变化时的倒易空间，其中"●"与"○"分别代表 $\sigma = 0$ 与 $\sigma = \max$ 时的结点

如果应力σ在一定范围内改变其大小，则每个倒易结点都相应地变为一条直线，直线的长度与它和原点之间的距离成正比，如图 9-23 所示。图中“●”与“○”分别代表$\sigma = 0$与$\sigma = \max$时的结点位置。如果应力的大小与方向都改变，则倒易结点变成一个个倒易畴。在任何一条由原点出发的直线上，畴的体积与它和原点之间的距离成正比，如图 9-24 所示。

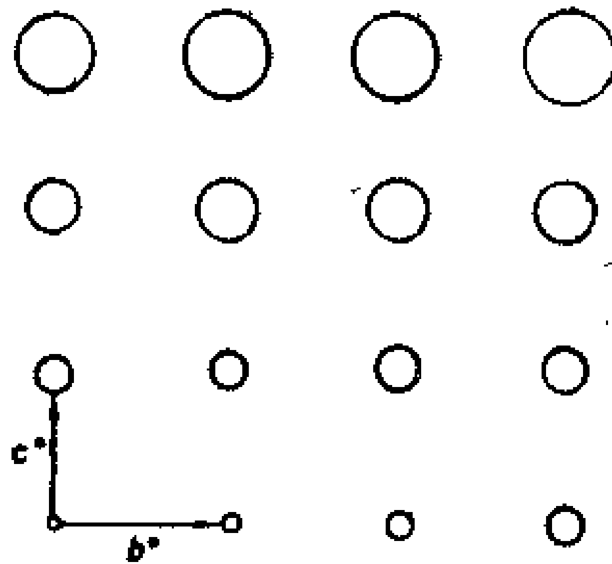


图 9-24　应力σ的大小与方向都改变时的倒易空间；在由倒易原点发出的任何直线上，圆球的直径与其到原点间的距离成正比

六、倒易面的对称性

（一）倒易面的制作

在加权倒易点阵中，绘出任意一过原点的倒易面(即绘出该面上的结点分布)的方法可以归结为：

1. 在倒易坐标 a^*、b^*、c^*中画出所要求的倒易面 $(uvw)^*$；

2. 平移 $(uvw)^*$，使其过倒易原点。于是得到过原点的倒易面上的两个结点的指数 h_1、k_1、l_1 与 h_2、k_2、l_2，并计算它们的结构振幅，使$|F_{h_1k_1l_1}|^2$与$|F_{h_2k_2l_2}|^2$不为零；

3. 计算倒易矢量长度 $|\boldsymbol{g}_{h_1k_1l_1}|$ 与 $|\boldsymbol{g}_{h_2k_2l_2}|$，以及它们之间的夹角 ϕ；

4. 用 $|\boldsymbol{g}_{h_1k_1l_1}|$、$|\boldsymbol{g}_{h_2k_2l_2}|$ 和 ϕ 进行平移，给出该面上的其他结点；

5. 利用结构因数的知识，在该面上补上结构因数不为零的所有结点，构成整个倒易面。

下面举例说明：

例 1：作面心立方晶系中的(311)*倒易面

立方晶系的倒易点阵仍为立方系，所以 $\boldsymbol{a}^*$、$\boldsymbol{b}^*$、$\boldsymbol{c}^*$之间相互垂直且等长。图 9-25 在 $\boldsymbol{a}^*$、$\boldsymbol{b}^*$、$\boldsymbol{c}^*$ 坐标系中给出了(311)*倒易面，此面在三个倒易轴上的截距分别为 1、2、3，即(311)*倒易面与三坐标轴的交点坐标分别为 100，030 和 003。要使该倒易面过原点，需将图中之面沿负 $\boldsymbol{a}^*$ 方向平移一个单位长度。这样，上述三个结点的坐标就分别变为 000，$\bar{1}30$ 和 $\bar{1}03$。因为面心立方晶体的加权倒易点阵中当指数奇偶混合时，结点的结构因数为零，因此应将上述指数乘以 2，得 000，$\bar{2}60$ 和 $\bar{2}06$。于是，我们得到了倒易面上的三个结点。

为了获得该面上其他结点的分布，计算倒易矢量 $\boldsymbol{g}_{\bar{2}60}$ 和 $\boldsymbol{g}_{\bar{2}06}$ 的长度与它们之间的夹角 ϕ。因为对于立方晶系：

$$|\boldsymbol{g}_{hkl}| = \frac{1}{d_{hkl}} = \frac{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}{a}$$

其中 a 为立方晶胞的棱长。于是：

$$|\boldsymbol{g}_{\bar{2}60}| = |\boldsymbol{g}_{\bar{2}06}| = 2\sqrt{10}/a$$

同时因：

$$\cos\phi = \frac{h_1h_2+k_1k_2+l_1l_2}{\sqrt{h_1^2+k_1^2+l_1^2}\sqrt{h_2^2+k_2^2+l_2^2}}$$

所以两倒易矢量之间的夹角 $\phi = 84.3°$。

按上述计算结果，先给出(311)*倒易面上 000、$\bar{2}60$ 和 $\bar{2}06$ 三点的位置，再以 $\boldsymbol{g}_{\bar{2}60}$ 和 $\boldsymbol{g}_{\bar{2}06}$ 为基矢进行平移，从而获得倒易面上

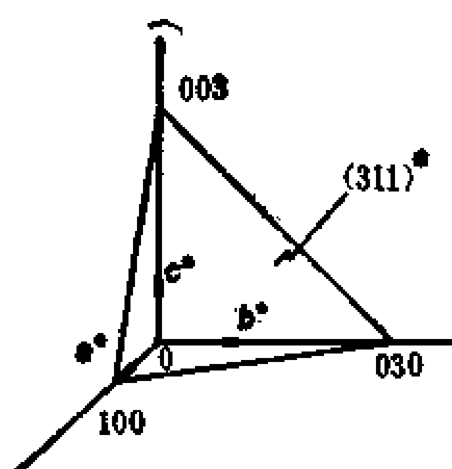


图 9-25 倒易面(311)*在坐标系 a*、b*、c*中的位置

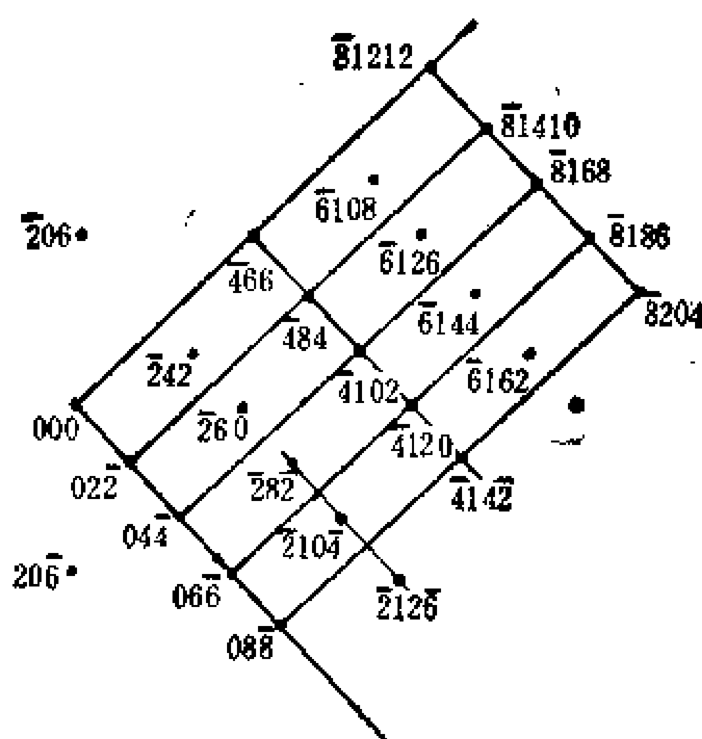


图 9-26 面心立方晶体中(311)*倒易面上的结点分布

的其他结点 $\bar{4}120$、$\bar{4}66$、$\bar{6}126$、$06\bar{6}$……。发现 $g_{\bar{4}66}\cdot g_{06\bar{6}}=0$，即 $g_{\bar{4}66}$ 与 $g_{06\bar{6}}$ 正交，所以用 $g_{\bar{4}66}$ 和 $g_{06\bar{6}}$ 为基矢更为方便。同时，从面心立方晶体的结构因数规律可以得知，在 000 与 $06\bar{6}$ 两结点之间还应有 $02\bar{2}$ 和 $04\bar{4}$ 结点；在 000 与 $\bar{4}120$ 两结点之间还应有 $\bar{2}60$ 结点。把这些结构因数 F 不为零的结点添加在适当的位置上，然后再平移，就得到了整个(311)*倒易面上的加权结点分布，如图9-26所示。

例 2：作密排六方晶体中的(111)*倒易面

图 9-27 在六方晶系的倒易基矢群 a^*、b^*、c^*中绘出(111)*倒易面，它与倒易基矢交点的坐标分别为 100、010、001。将图中之平面平移，使之过原点，上述三点的坐标则变为 000，$\bar{1}10$、$\bar{1}01$。下面计算 $g_{\bar{1}10}$ 与 $g_{\bar{1}01}$ 的长度与它们之间的夹角 ϕ。

根据六方晶系面间距公式有：

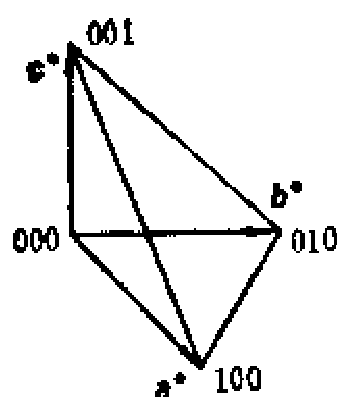


图 9-27　六方晶系倒易点阵中 (111)* 面与三基矢 a*、b*、c* 的交点

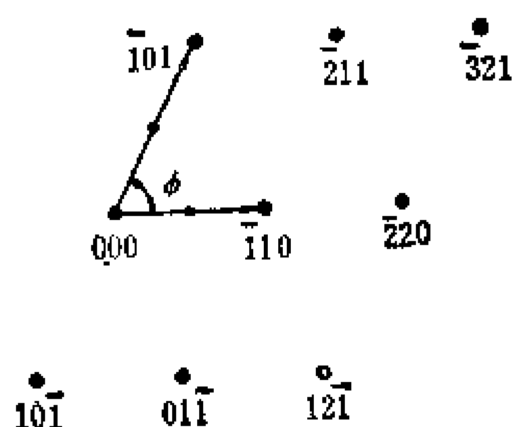


图 9-28　密排六方晶体中(111)* 倒易面上的结点分布

$$\frac{|\boldsymbol{g}_{\bar{1}10}|}{|\boldsymbol{g}_{\bar{1}01}|}=\frac{\sqrt{\frac{4}{3a^2}(h_1^2+k_1^2+l_1^2)+\frac{l_1^2}{c^2}}}{\sqrt{\frac{4}{3a^2}(h_2^2+k_2^2+l_2^2)+\frac{l_2^2}{c^2}}}=\frac{2/\sqrt{3}}{\sqrt{\frac{4}{3}+\frac{a^2}{c^2}}}$$

$$=0.88$$

于是:

$$|\boldsymbol{g}_{\bar{1}10}|=0.88|\boldsymbol{g}_{\bar{1}01}|$$

而:

$$\cos\phi=\left[h_1h_2+k_1k_2+0.5(h_1k_2+h_2k_1)+\frac{3a^2}{4c^2}l_1l_2\right]\Big/$$
$$\left\{\left[h_1^2+k_1^2+h_1k_1+\left(\frac{3a^2}{4c^2}\right)l_1^2\right]^{1/2}\right.$$
$$\left.\times\left[h_2^2+k_2^2+h_2k_2+\left(\frac{3a^2}{4c^2}\right)l_2^2\right]^{1/2}\right\}$$

表 9-3　倒易面的对称性

五种二维倒易点阵	倒易面加权后点分布	相应的点群	可能属于的晶系
		2	三斜、单斜、正交、正方、立方、六方、菱形
或		2mm	单斜、正交、正方立方、六方、菱形
		4	正方，立方
		4mm	正方，立方
		6	立方、六方、菱形
		6mm	同上

$$= \frac{0.5}{\sqrt{1+\frac{3a^2}{4c^2}}} = 0.44$$

于是 $\phi = 63.8°$。

按上述计算结果，绘出(111)*倒易面中的 000、$\bar{1}10$ 和 $\bar{1}01$，再以 $g_{\bar{1}10}$ 和 $g_{\bar{1}01}$ 为基矢进行平移，获得整个(111)*倒易面中的结点分布，图 9-28 (111)*倒易面为四指数系统中的$(11\bar{2}3)$*倒易面。

（二）倒易面的对称性

倒易面是二维图形，可以证明，它与正点阵中的平面点阵一样，只可能具有 5 种形式，即斜形、矩形、有心矩形(或菱形)、正方形和三角形。由于倒易点阵也具有平移特性，所以二维倒易点阵也只能存在 1、2、3、4 和 6 次对称轴。因此，倒易面应与平面正点阵一样，具有 10 种点群，即 1、2、2m、3、3mm、4、4mm、6、6mm 和m。

由于倒易面与电子衍射谱相对应，而电子衍射不能区分(hkl)与 ($\bar{h}\bar{k}\bar{l}$)，这相当于给倒易面加上了一个二次轴。这时，倒易面只具有 6 种点群，即 2、2m、4、4mm、6 和 6mm。这 6 种点群分别属于前面谈的 5 种平面倒易点阵。

表 9-3 给出倒易面所属的平面倒易点阵、相应的加权倒易结点分布、倒易面具有的点群和可能与其相适应的晶系。从表中看出，倒易面的对称性越低，可能与其相应的晶系数越多；对称性越高，则可能与其相应的晶系数越少。例如斜形点阵具有点群 2，可能属于 7 种晶系；而正方形点阵具有点群 4 或 4mm，只能属于立方晶系或正方晶系。

七、六方晶系倒易点阵中的指数问题

对于六方晶系的正点阵，通用的基矢群为 $\boldsymbol{a}_1$、$\boldsymbol{a}_2$、$\boldsymbol{c}$，$\boldsymbol{a}_1$与 $\boldsymbol{a}_2$等

长，且夹角为 120°，$\boldsymbol{c}$ 垂直于 $\boldsymbol{a}_1$ 和 $\boldsymbol{a}_2$。于是它的倒易点阵基矢群应为：

$$\boldsymbol{a}_1^* = \frac{\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{c}}{v}$$

$$\boldsymbol{a}_2^* = \frac{\boldsymbol{c} \times \boldsymbol{a}_1}{v}$$

$$\boldsymbol{c}^* = \frac{\boldsymbol{a}_1 \times \boldsymbol{a}_2}{v}$$

其中 $v = a^2 c\sqrt{1 - \cos^2 120°} = (\sqrt{3}/2)a^2 c$。同时可以得到：

$$a_1^* = a_2^* = \frac{2}{\sqrt{3}}a$$

$$c^* = \frac{1}{c}$$

$$\alpha^* = \beta^* = 90°$$

$$\gamma^* = \cos^{-1}(-\cos\gamma) = 60°$$

图 9-29 是六方晶系中正(a)，倒(b)点阵在(001)面上的投影。图中分别给出正、倒点阵中的结点“●”与基矢。

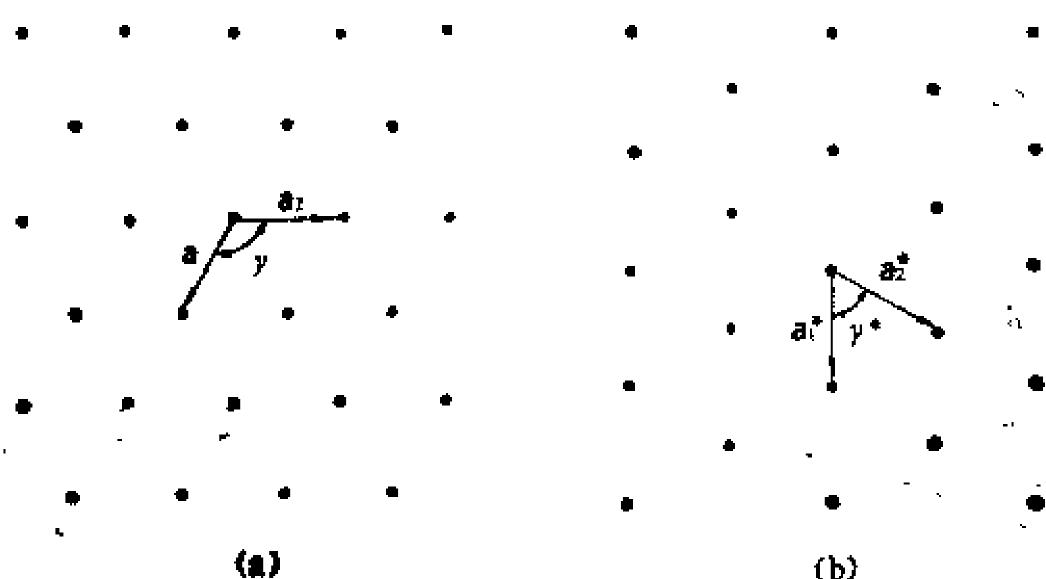


图 9-29　六方晶系的正点阵与倒易点阵在(001)面上的投影，“●”为结点，图中的矢量为基矢

(a) 正点阵的投影；(b) 倒易点阵的投影

从图 9-29(b) 中可以看出，倒易点阵也存在平行于 c^* 的六次轴。但以 a_1^*、a_2^*、c^* 为基矢时，其六棱柱面的指数分别为 $(110)^*$、$(010)^*$、$(\bar{1}00)^*$、$(\bar{1}\bar{1}0)^*$、$(0\bar{1}0)^*$和$(100)^*$，没有呈现出六次对称性。

为了使上述倒易面在指数上能表现出其六次对称性，可以选用四轴坐标系统，使倒易基面上的 3 个轴互成 120°。注意到正点阵中米勒指数 (hkl) 与米勒-布拉维指数 $(hkil)$ 之间的关系，即 $i=-(h+k)$。所选择的倒易坐标 A_1^*、A_2^*、A_3^*和 c^*，应使倒易结点 $hkil$ 与三轴系 a_1^*、a_2^*、c^*中的同一结点坐标 hkl 中的三个指数相等，并且 $i=-(h+k)$。

让我们利用上述关系寻找 A_1^*、A_2^* 与 A_3^*。倒易点阵中某一基矢 g 在两个坐标系中分别为 g_{hkl} 和 g_{hkil}，应有：

$$ha_1^*+ka_2^*+lc^*=hA_1^*+kA_2^*+iA_3^*+lc^*$$

因为：

$$i=-(h+k)$$

$$A_3^*=-(A_1^*+A_2^*)$$

所以：

$$ha_1^*+ka_2^*+lc^*=hA_1^*+kA_2^*+(h+k)(A_1^*+A_2^*)+lc^*$$

整理后得到：

$$\begin{cases}a_1^*=2A_1^*+A_2^*\\ a_2^*=A_1^*+2A_2^*\end{cases}\tag{9-23}$$

或：

$$\begin{aligned}A_1^*&=\frac{1}{3}(2a_1^*-a_2^*)\\ A_2^*&=\frac{1}{3}(2a_2^*-a_1^*)\end{aligned}\tag{9-24}$$

图 9-30 给出了这两个坐标系之间的关系。图中"●"为结点位置，细实线表示由 a_1^*、a_2^* 决定的平行四边形，粗实线表示由

图 9-30 六方晶系的倒易点阵中的三轴系 a_1^*、a_2^* 与 c^* 和四轴系 A_1^*、A_2^*、A_3^*、c^*；图中只给出在基面上的矢量，"●"为倒易结点位置，细实线为由 a_1^*、a_2^* 决定的平行四边形，粗实线为由 A_1^*、A_2^*、A_3^*决定的六角形

A_1^*、A_2^*、A_3^*决定的六角形。从图中看出，A_1^*、A_2^*、A_3^*与 a_1、a_2、a_3 平行。以 A_1^*、A_2^*、A_3^*、c^* 为坐标时，由结点的指数上能反应出了六次对称性。此时倒易六方阵胞的柱面指数为$(11\bar{2}0)^*$、$(\bar{1}2\bar{1}0)^*$、$(\bar{2}110)^*$、$(\bar{1}\bar{1}20)^*$、$(1\bar{2}10)^*$和 $(2\bar{1}\bar{1}0)^*$，也具有六次对称性。同时，此坐标系中的结点指数 $hkil$ 与正点阵中的 $(hkil)$ 面存在倒易关系即 $(hkil)\perp[hkil]^*$，或 $(hkil)\perp g_{hkil}$。

如果$(hkil)$面属于 $[uvtw]$ 晶带，应有 $g_{hkil}\cdot r_{uvtw}=0$，于是

$$(hA_1^*+kA_2^*+iA_3^*+lc^*)\cdot(ua_1+va_2+ta_3+wc^*)=0$$

将(9-24)式代入并整理后得出：

$$hu + kv + it + lw = 0 \qquad (9\text{-}25)$$

这就是六方晶系中用四指数时的晶带方程。将正点阵中的指数关系：

$$u = \frac{1}{3}(2U - V)$$

$$v = \frac{1}{3}(2V - U)$$

$$w = W$$

代入，并整理，得出：

$$hU + kV + lW = 0 \qquad (9\text{-}26)$$

这是六方晶系中用三指数时的晶带方程。

八、利用倒易空间解释衍射现象

衍射理论告诉我们，对于一定的晶体，如果让入射线通过其加权倒易点阵的原点 0，并以入射线波长的倒数 $1/\lambda$ 为半径作一个球，让球面通过倒易原点 0′，球心 0 在入射线上，称此为爱瓦德球，则凡有结点落在球面上时，都会从球心 0 通过些结点射出一条衍射线。图 9-31 表示有 6 个结点落在爱瓦德球上，所以有 6 条衍射线从 0 射出，它们的指数是 $\overline{7}50$、$\overline{2}40$、$\overline{1}30$、$\overline{13}0$、$\overline{24}0$ 和 $\overline{75}0$。

于是，用这种方法可以解释各种衍射图样，称之为爱瓦德图解。图 9-31 就是用一定波长的辐射照固定不动的单晶体时的爱瓦德图解。由图中看出，这种情况可获得衍射线的几率很小。

为了增加产生衍射线的几率，可以让晶体绕对称性高的倒易基矢转动，入射线垂直于此轴。这时凡能穿过爱瓦德球的结点，都能产生衍射线。称这种获得衍射线的办法为转动晶体法。图9-32是转动晶体法的爱瓦德图解。转轴为立方晶系的 $\mathbf{c}^*$。虚线表示

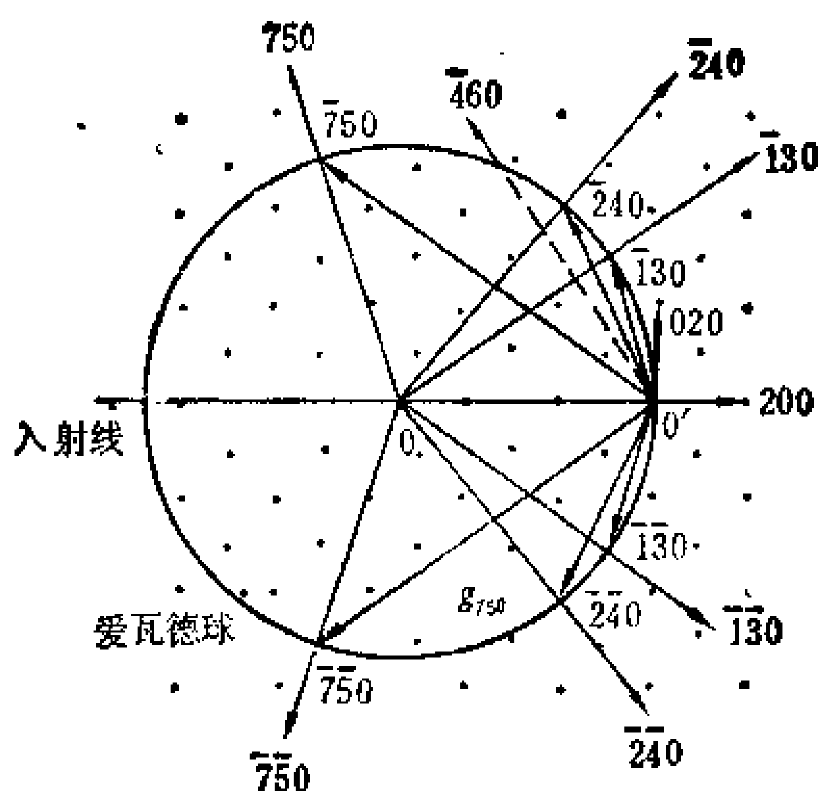


图 9-31 产生衍射线的爱瓦德图解，入射线过倒易原点 0′，以入射线的波长倒数 $1/\lambda$ 为半径作爱瓦德球，球面应通过倒易原点 0′，凡落在球面上的加权倒易结点，都对产生衍射线有贡献，即由球心 0 通过此结点"射出"一条衍射线，图中所示情况可以产生 6 条衍射线

晶体转动时倒易结点的运动轨迹。

也可以用一定波长范围的入射线照射单晶体，以增加产生衍射线的几率。图 9-33 表示的是用波长在 λ_{min}—λ_{max} 之间连续变化的辐射，照固定不动的单晶体时的爱瓦德图解。凡是落在分别以 $1/\lambda_{min}$ 与 $1/\lambda_{max}$ 为半径的两个球面之间的结点，都对产生衍射线有贡献。

当用波长一定的辐射照射多晶体或单晶体粉末时，也能够获得较多的衍射线。因为对于取向随机分布的多晶体，当其晶粒数目足够多时，其倒易点阵中相应于每一个结点都构成一个倒易球

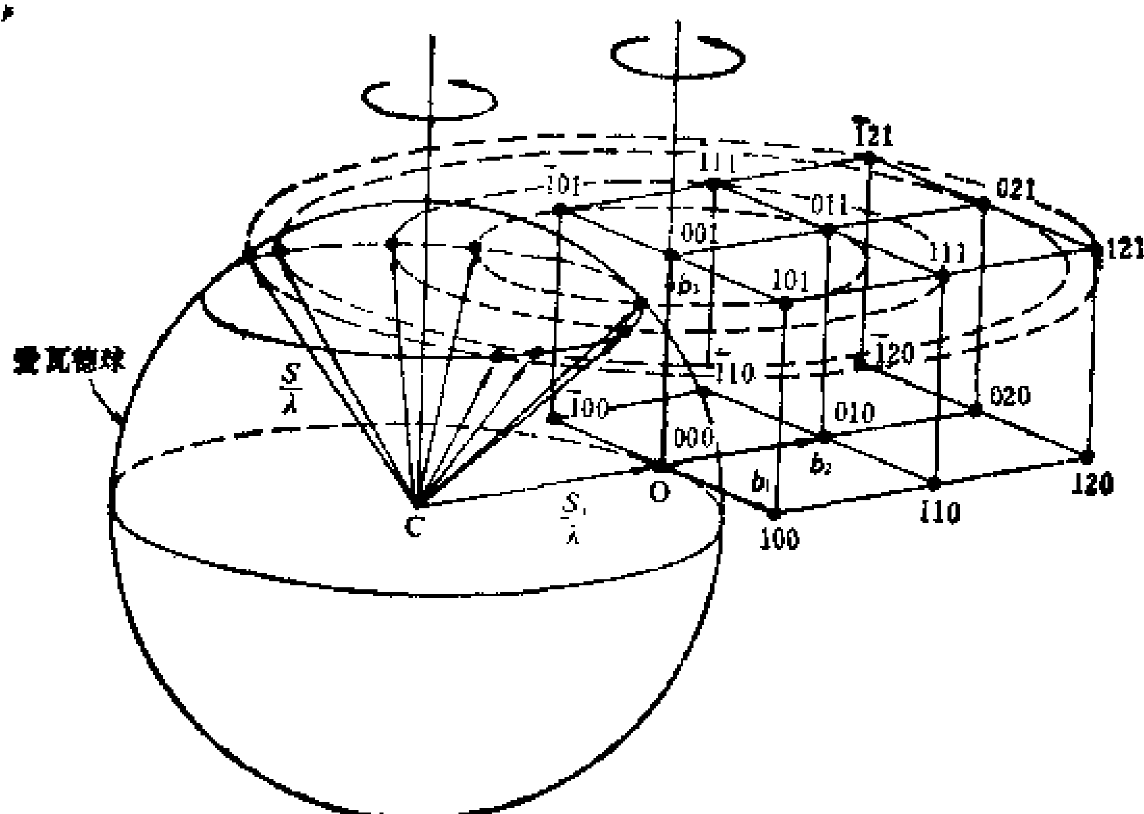


图 9-32 转动晶体时的爱瓦德图解，晶体为立方系，转轴为 c，倒易点阵的转轴为 c^*，入射线垂直于 c^*，图中的虚线为倒易结点的运动轨迹，凡此轨迹能与爱瓦德球相交者，都对产生衍射线有贡献

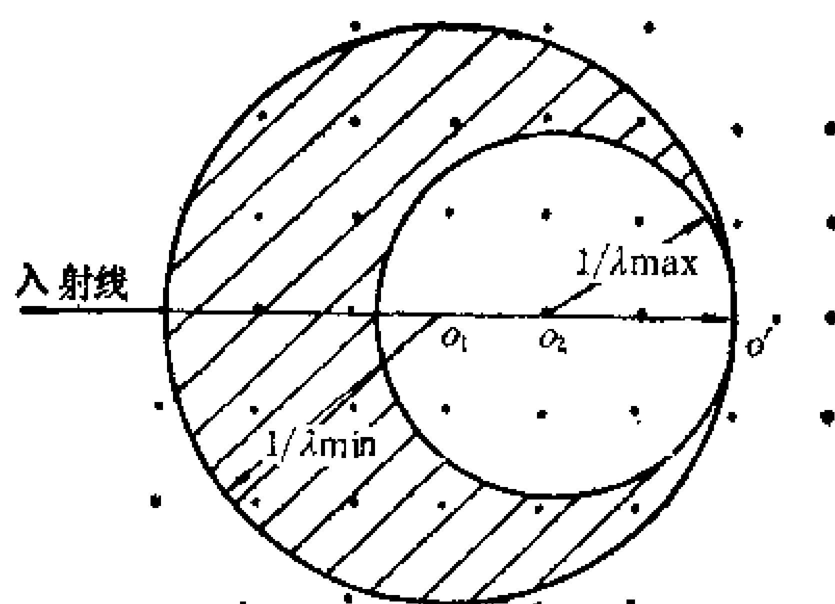


图 9-33 波长在 $\lambda_{min}-\lambda_{max}$ 之间连续变化的辐射照射固定不动的单晶体时的爱瓦德图解，凡结点落在以 $1/\lambda_{min}$ 和 $1/\lambda_{max}$ 为半径的爱瓦德球之间时（图中的影线区），都对产生衍射线有贡献

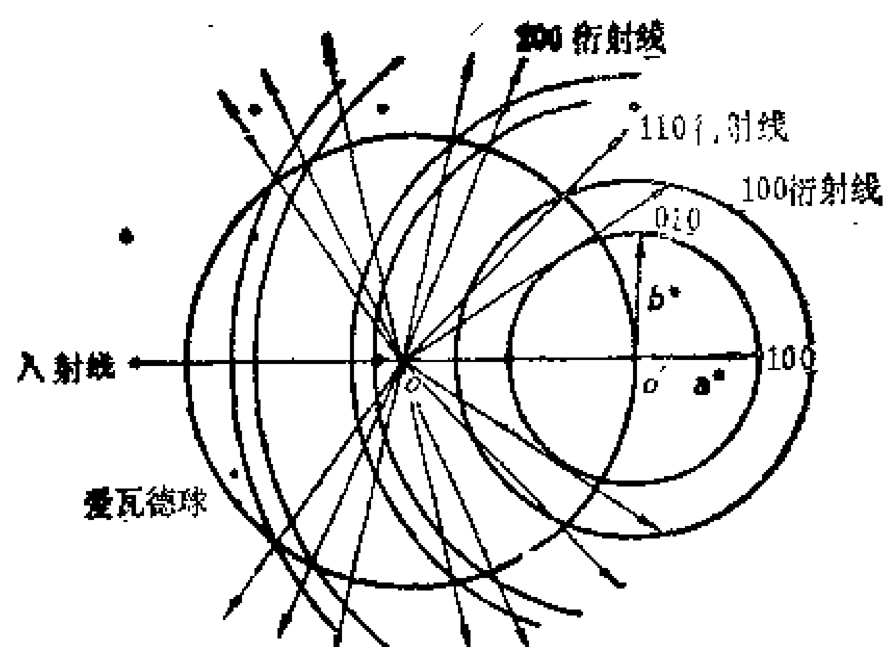


图 9-34　用波长一定的辐射照多晶体时的爱瓦德图解，凡倒易球与爱瓦德球相交处都有衍射线射出

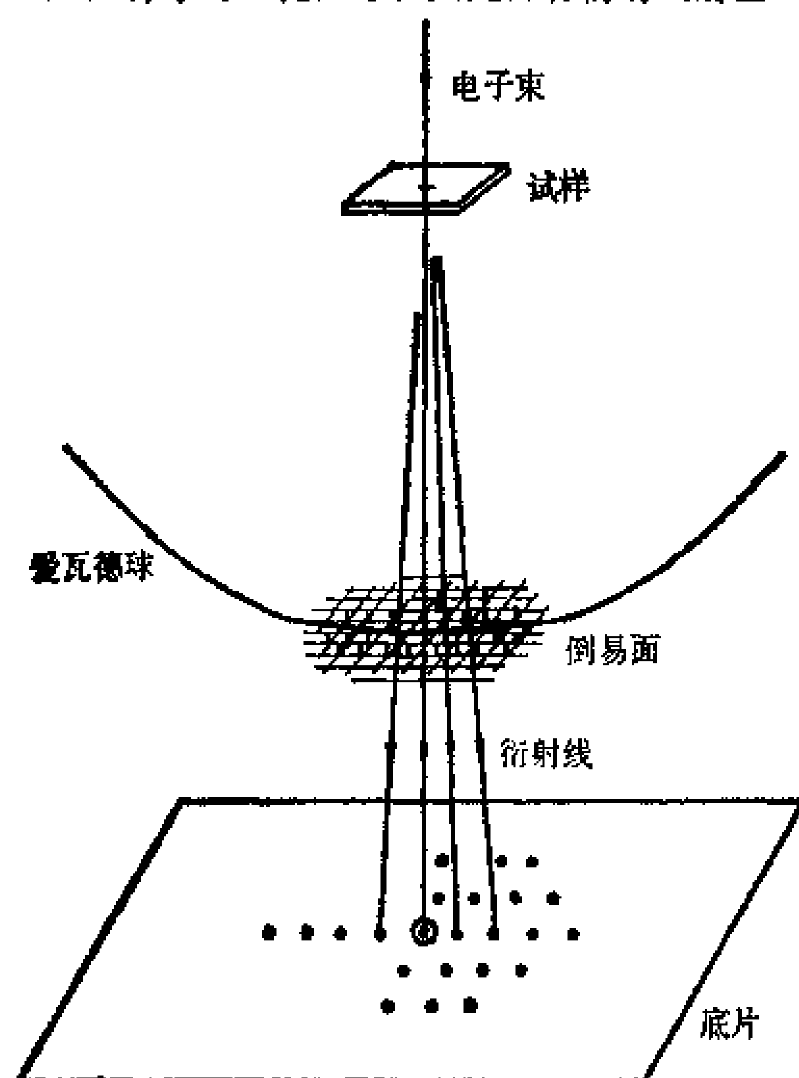


图 9-35　电子衍射的布局与爱瓦德图解．电子束垂直于试样和底片，爱瓦德球半径很大，倒易面上的结点为一个个与试样垂直的倒易杆．底片上记录的电子衍射谱，实质上是与爱瓦德球相切的倒易面的投影

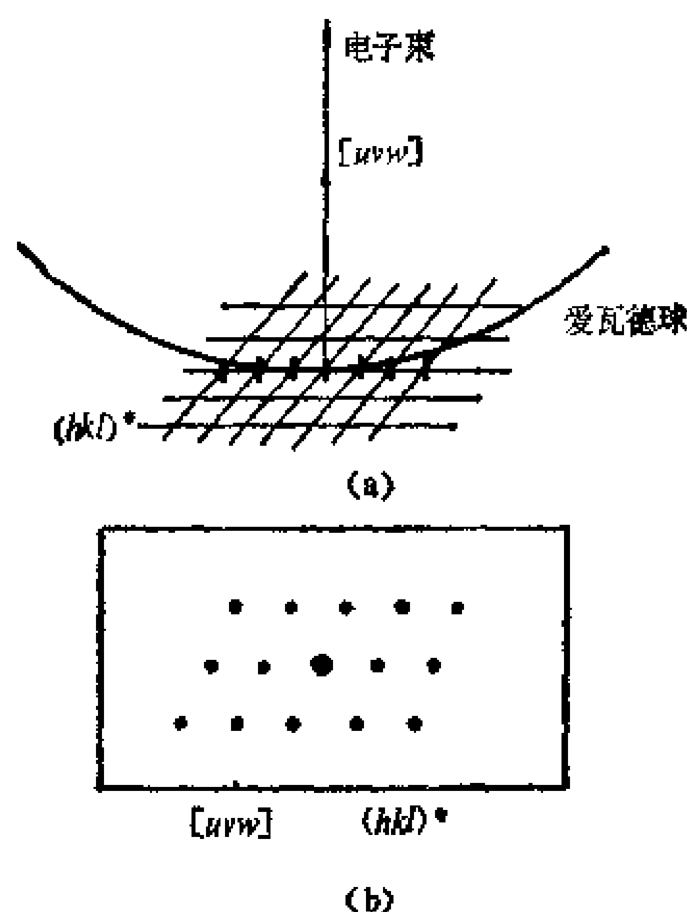
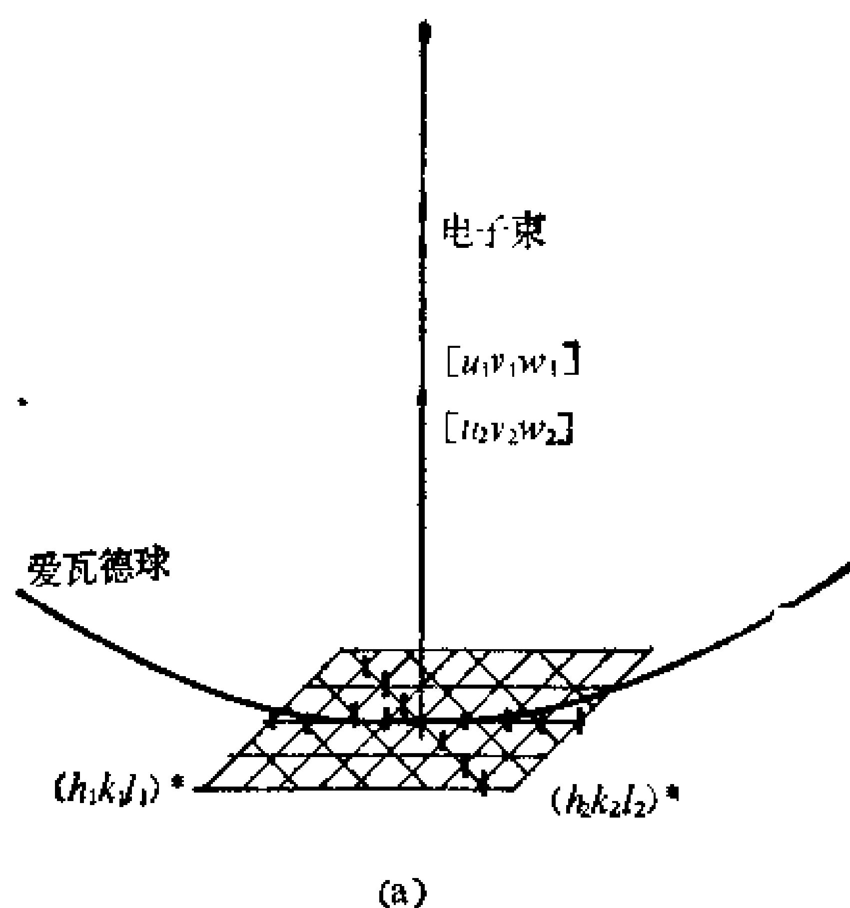


图 9-36 单相物质的电子衍射谱及其爱瓦德图解；图(a)中给出该物质的晶带轴 [uvw] 与晶带的倒易面 (hkl)*，晶带轴平行于电子束方向；图(b)中的大圆点为电子束直射部位，其他构成斜形图样的点为衍射斑，可以清楚地看出它由一套点阵构成。图(b)中标出了晶带 [uvw] 与倒易面 (hkl)*

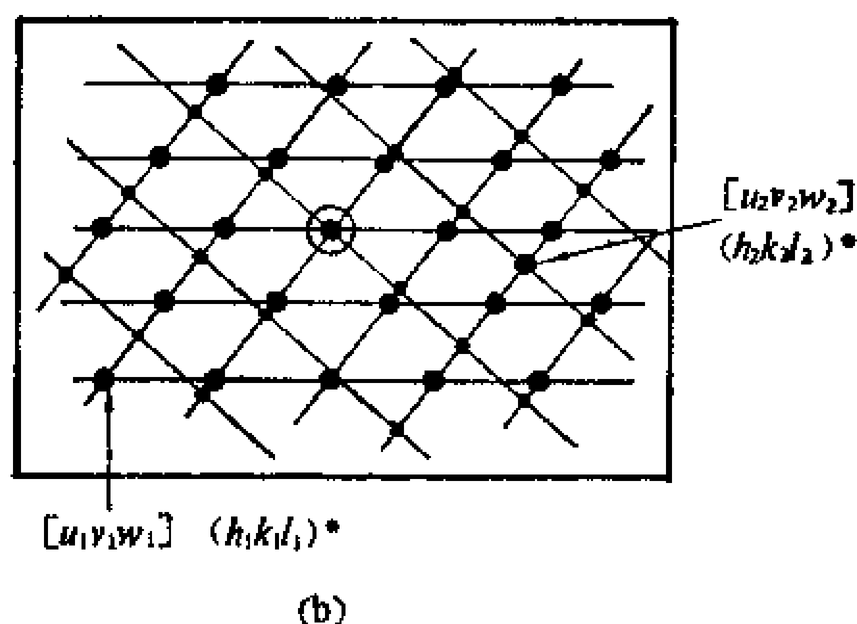
面。图 9-34 给出一定波长的幅射照射立方系多晶体时的爱瓦德图解。图中以 0′为心的球都是倒易球面，凡倒易球面与爱瓦德球面相交处，都有衍射线射出。

Buerger 设计了一个巧妙的照相装置——旋进相机，能在一张底片上记录一个倒易面上的结点分布。

电子衍射时，电子的波长很小，一般为 0.03—0.06 Å，试样极薄，几百个阵胞。于是爱瓦德球极大，而倒易结点变成倒易杆。所以当电子束垂直于试样照射时，一般情况下底片上记录的是零层倒易面的投影，如图 9-35 所示。这也是以试样表面方向为带轴的



(a)



(b)

图 9-37 两相物质的电子衍射谱及其爱瓦德图解

(a) 爱瓦德图解，两相物质的晶带轴分别为 $[u_1v_1w_1]$ 和 $[u_2v_2w_2]$，它们相应的倒易面分别为 $(h_1k_1l_1)^*$ 和 $(h_2k_2l_2)^*$，图中只给出了倒易杆；(b) 衍射谱，可以清楚地看出衍射谱由两套衍射斑构成

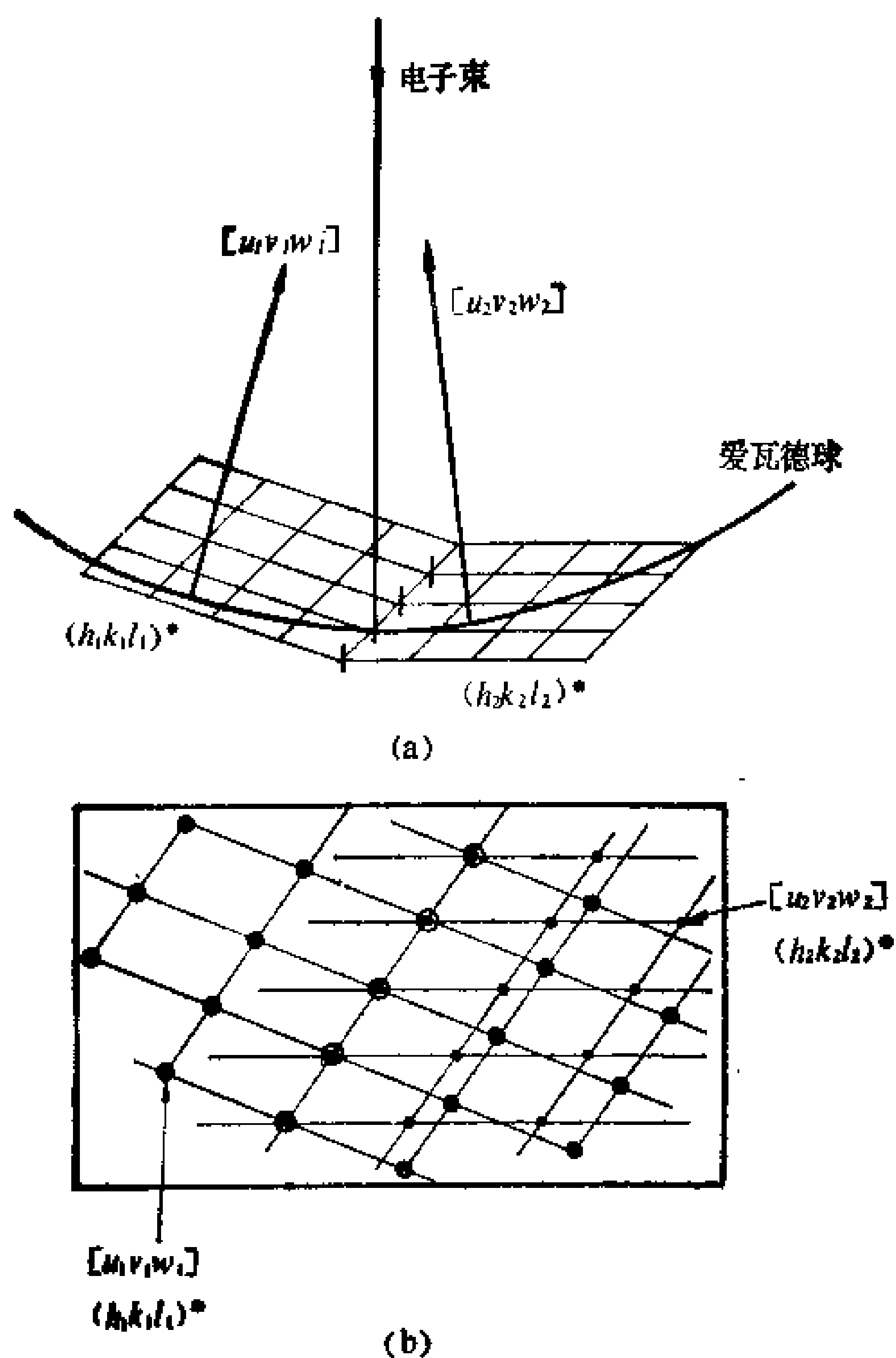


图 9-38　两个零阶晶带的衍射谱及其爱瓦德图解

(a) 爱瓦德图解，图中给出两个与入射电子束有微小偏离的带轴 $[u_1v_1w_1]$ 和 $[u_2v_2w_2]$ 与两个零阶倒易面 $(h_1k_1l_1)^*$ 和 $(h_2k_2l_2)^*$；(b) 衍射谱，其中一条直线上的衍射斑为两套衍射谱共有

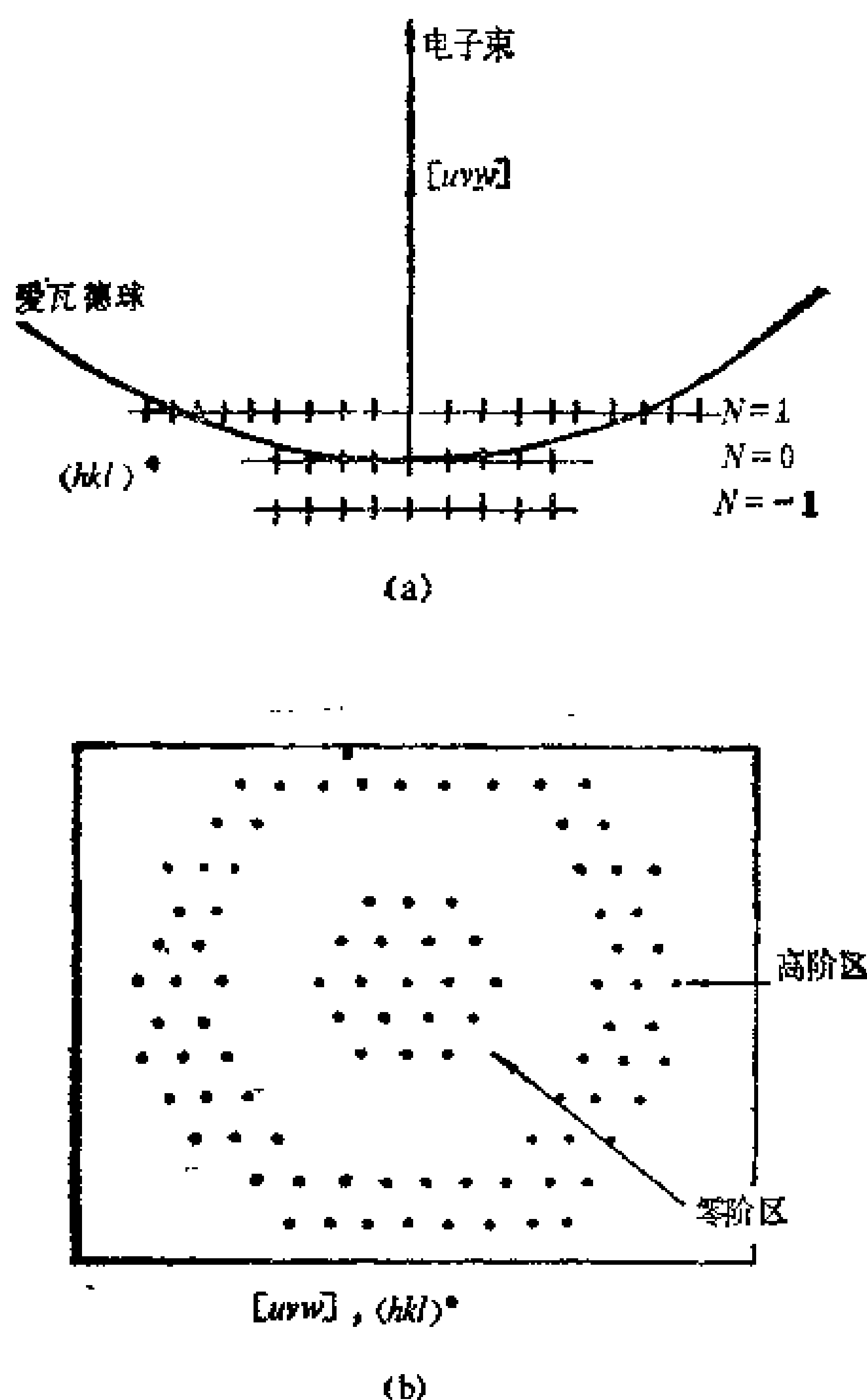


图 9-39　包含高阶劳埃斑的电子衍射谱

(a) 爱瓦德图解，图中给出了 [uvw] 晶带的一阶、零阶和负一阶倒易面 $(hkl)^*$；(b) 衍射谱，它包含有[uvw]晶带的零阶和一阶衍射斑

晶带的投影。一般在电子衍射照片上标明试样表面法线 [uvw]和相应于 [uvw] 晶带的倒易面 $(hkl)^*$。

图 9-35 到 9-39 分别给出几种典型的电子衍射谱与其相应的

爱瓦德图解。由于电子衍射谱是倒易面的"像"，所以只要画出爱瓦德球与倒易面，就可以清楚地解释电子衍射谱的形貌。因此，这里采取"看图识字"的办法，请读者自己以图形解释电子衍射谱的形成，作者不再多费笔墨。

多晶体的电子衍射图样是一系列以直射束为心的同心圆。

练 习 题

1. 六方晶系中 (0001) 面上的结点分布如图 9-40 所示，$|\boldsymbol{a}_1| = |\boldsymbol{a}_2| = 2.50\,\text{Å}$，$\gamma = 120°$. 请在坐标纸上画出$(0001)^*$倒易面上的结点分布，并注明长度单位.

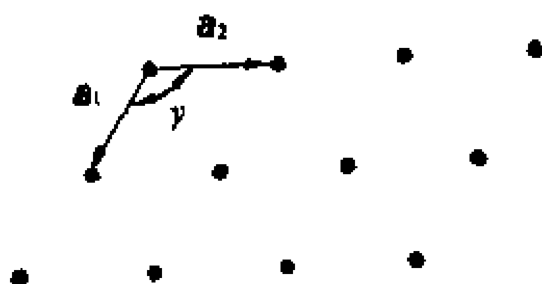


图 9-40　六方晶系中(0001)面上的结点分布及基矢 $\boldsymbol{a}_1$ 与 $\boldsymbol{a}_2$

2. 请计算立方晶系中{100}与{111}面之间的夹角。
3. 请计算出六方晶系中(111)和$(11\bar{2}1)$面的法线方向的指数。
4. 请问在立方晶系中，与方向[111]垂直的晶面与倒易面指数各是什么？
5. 请问与六方晶系中的 [111] 方向垂直的晶面与倒易面的指数各是什么？
6. 求立方晶系中倒易面$(111)^*$的法线方向及与其垂直的正点阵矢量。
7. 求六方晶系中倒易面$(111)^*$的法线方向及与其垂直的正点阵矢量。

8. 求两晶面 ($h_1k_1l_1$) 与 ($h_2k_2l_2$) 交线的指数 [uvw] 与该两面指数的关系。

9. 求点阵中某一点 UVW 是否在平面 (hkl) 上的条件。

10. 请作体心立方晶体的(112)*倒易面。

复 习 题

1. 请说明什么是倒易点阵与倒易矢。
2. 请说明正、倒点阵之间的主要关系。
3. 试说明倒易点阵在晶体学计算问题中的应用。
4. 请证明广义晶带定律。
5. 请用倒易点阵解释衍射图样。

第十章　晶体中的坐标变换

对于某种特定的点阵，阵胞有不同的取法，例如可以取原胞，也可以取复胞。又如对以三角形为底边的点阵，当其以$ABAB\cdots$顺序排列时，可以取六方阵胞，也可以取正交阵胞；当其以ABC $ABC\cdots$顺序排列时，可以取六方阵胞，也可以取菱形阵胞。对应于不同的阵胞取法，点阵中给定的点、方向与平面的指数不同。所以有必要讨论由于不同的阵胞取法引起的点、线、面指数的变化。

一、坐 标 变 换

如果某一点阵，以两种方式选取阵胞，它们的基矢分别为 $\boldsymbol{a}_1$、$\boldsymbol{a}_2$、$\boldsymbol{a}_3$ 和 $\boldsymbol{b}_1$、$\boldsymbol{b}_2$、$\boldsymbol{b}_3$，则这两组坐标轴（任意坐标系）之间的变换关系是：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{b}_1 &= s_{11}\boldsymbol{a}_1 + s_{12}\boldsymbol{a}_2 + s_{13}\boldsymbol{a}_3 \\ \boldsymbol{b}_2 &= s_{21}\boldsymbol{a}_1 + s_{22}\boldsymbol{a}_2 + s_{23}\boldsymbol{a}_3 \\ \boldsymbol{b}_3 &= s_{31}\boldsymbol{a}_1 + s_{32}\boldsymbol{a}_2 + s_{33}\boldsymbol{a}_3 \end{aligned} \tag{10-1}$$

和

$$\begin{aligned} \boldsymbol{a}_1 &= t_{11}\boldsymbol{b}_1 + t_{12}\boldsymbol{b}_2 + t_{13}\boldsymbol{b}_3 \\ \boldsymbol{a}_2 &= t_{21}\boldsymbol{b}_1 + t_{22}\boldsymbol{b}_2 + t_{23}\boldsymbol{b}_3 \\ \boldsymbol{a}_3 &= t_{31}\boldsymbol{b}_1 + t_{32}\boldsymbol{b}_2 + t_{33}\boldsymbol{b}_3 \end{aligned} \tag{10-2}$$

或写成矩阵型式：

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{b}_1 \\ \boldsymbol{b}_2 \\ \boldsymbol{b}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} \\ s_{21} & s_{22} & s_{23} \\ s_{31} & s_{32} & s_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{a}_1 \\ \boldsymbol{a}_2 \\ \boldsymbol{a}_3 \end{bmatrix}$$

和：

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{a}_1 \\ \boldsymbol{a}_2 \\ \boldsymbol{a}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} t_{11} & t_{12} & t_{13} \\ t_{21} & t_{22} & t_{23} \\ t_{31} & t_{32} & t_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{b}_1 \\ \boldsymbol{b}_2 \\ \boldsymbol{b}_3 \end{bmatrix}$$

同时，可以简写成：

$$[\boldsymbol{b}] = [s][\boldsymbol{a}] \tag{10-3}$$

$$[\boldsymbol{a}] = [t][\boldsymbol{b}] \tag{10-4}$$

将(10-4)左乘$[s]$，有：

$$[s][\boldsymbol{a}] = [s][t][\boldsymbol{b}]$$

得到：

$$[\boldsymbol{b}] = [s][t][\boldsymbol{b}]$$

所以：

$$[s][t] = [I]$$

$[I]$为单位矩阵．同样的方法可以得到：

$$[t][s] = [I]$$

所以$[s]$与$[t]$互为逆矩阵．

下面具体讨论几种情况时的坐标变换矩阵。

（一）面心立方复胞与其对应的原胞之间的变换

图 10-1 给出了立方晶系中的面心立方阵胞基矢群 $\boldsymbol{a}_1$、$\boldsymbol{a}_2$、$\boldsymbol{a}_3$ 和原胞的基矢群 $\boldsymbol{b}_1$、$\boldsymbol{b}_2$、$\boldsymbol{b}_3$．从图中可以看出它们之间的关系是：

$$\boldsymbol{b}_1 = \frac{1}{2}\boldsymbol{a}_1 + \frac{1}{2}\boldsymbol{a}_2$$

$$\boldsymbol{b}_2 = \frac{1}{2}\boldsymbol{a}_2 + \frac{1}{2}\boldsymbol{a}_3$$

$$b_3 = \frac{1}{2} a_1 + \frac{1}{2} a_3$$

故有：

$$s = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad (10-5)$$

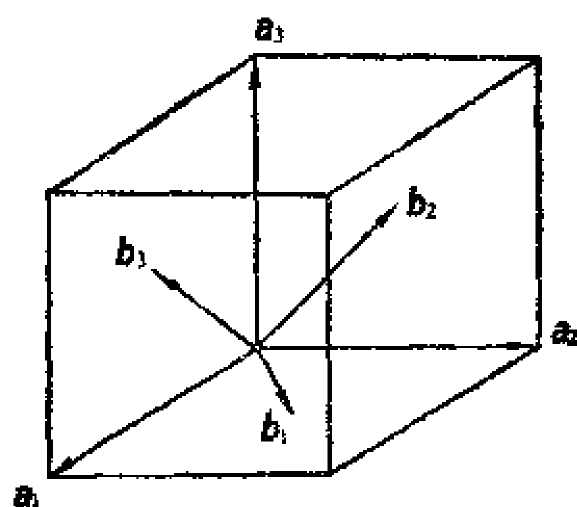


图 10-1　面心立方阵胞的基矢群 a_1、a_2、a_3 和其原胞的基矢群 b_1、b_2、b_3

（二）体心立方复胞与其对应的原胞之间的变换关系

图 10-2 给出了体心复胞与其对应原胞的基矢群 a_1、a_2、a_3 与 b_1、b_2、b_3。图中绘出了 a_1、a_2、a_3 构成的阵胞的一部分，以及与该阵胞相邻的三个阵胞。原胞的基矢分别指向这三个阵胞的体心。于是两个基矢群之间的关系为：

$$\boldsymbol{b}_1 = \frac{1}{2}\boldsymbol{a}_1 + \frac{1}{2}\boldsymbol{a}_2 - \frac{1}{2}\boldsymbol{a}_3$$

$$\boldsymbol{b}_2 = -\frac{1}{2}\boldsymbol{a}_1 + \frac{1}{2}\boldsymbol{a}_2 + \frac{1}{2}\boldsymbol{a}_3$$

$$\boldsymbol{b}_3 = \frac{1}{2}\boldsymbol{a}_1 - \frac{1}{2}\boldsymbol{a}_2 + \frac{1}{2}\boldsymbol{a}_3$$

故有：

$$[s] = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \end{bmatrix} \tag{10-6}$$

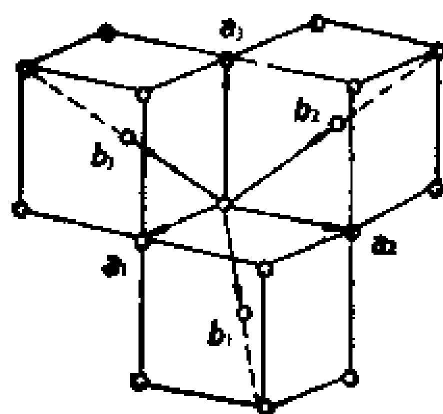


图 10-2 体心立方复胞与其对应原胞的基矢群 $\boldsymbol{a}_1$、$\boldsymbol{a}_2$、$\boldsymbol{a}_3$ 与 $\boldsymbol{b}_1$、$\boldsymbol{b}_2$、$\boldsymbol{b}_3$；$\boldsymbol{b}_1$、$\boldsymbol{b}_2$、$\boldsymbol{b}_3$ 分别指向由 $\boldsymbol{a}_1$、$\boldsymbol{a}_2$、$\boldsymbol{a}_3$ 所构成的阵胞相邻的三个阵胞的体心

(三) 六方晶系中，六方与菱形阵胞之间的变换关系

在六方晶系中，可以选用以 $\boldsymbol{a}_1$、$\boldsymbol{a}_2$ 为基矢群的六方阵胞，如图 10-3 (a)、(b) 所示，也可以选用以 $\boldsymbol{a}$、$\boldsymbol{b}$、$\boldsymbol{c}$ 为基矢群的正交系复胞，如图 10-3(c)、(d) 所示。(b) 和 (d)分别为(a) 与 (c)在基面上的投影。于是两个坐标系有如下的关系：

$$\boldsymbol{a} = \boldsymbol{a}_1$$
$$\boldsymbol{b} = \boldsymbol{a}_1 + 2\boldsymbol{a}_2$$
$$\boldsymbol{c} = \boldsymbol{c}$$

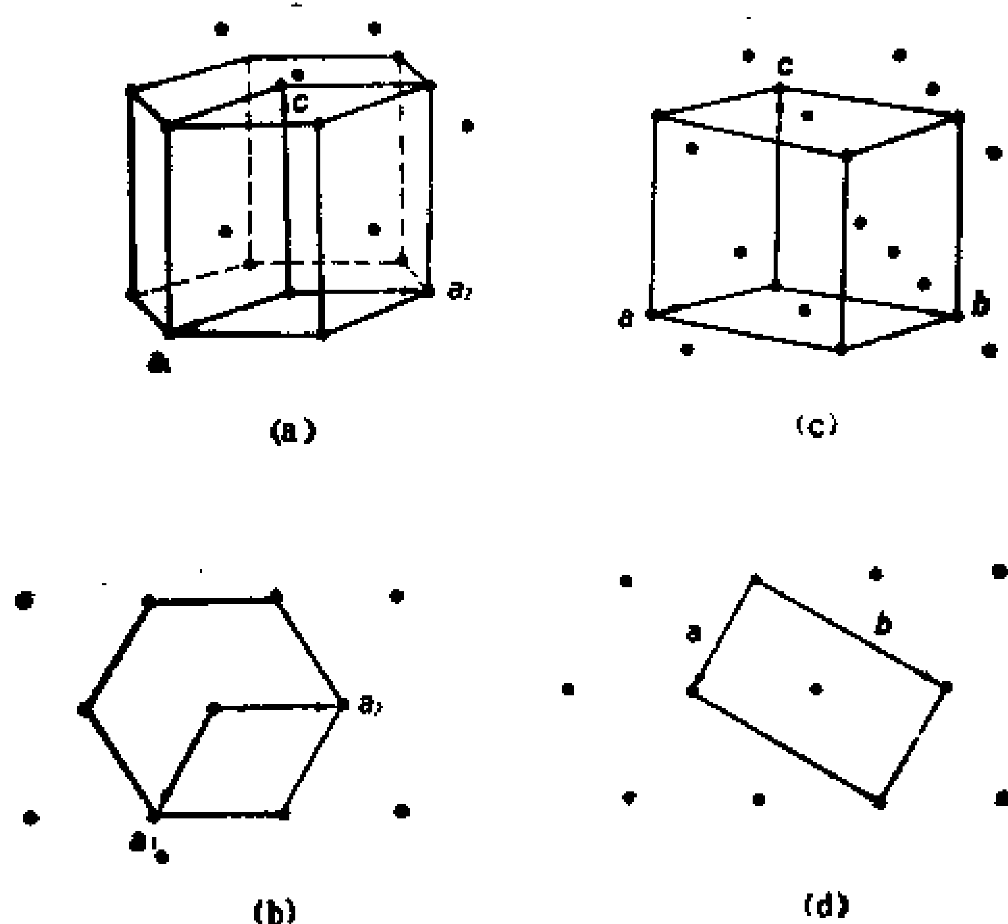


图 10-3 六方点阵中的六方阵胞与正交阵胞

(a)、(b) 为六方阵胞中的基矢 $\boldsymbol{a}_1$、$\boldsymbol{a}_2$、$\boldsymbol{c}$ 与其在基面上的投影；
(c)、(d) 为正交阵胞中的基矢 $\boldsymbol{a}$、$\boldsymbol{b}$、$\boldsymbol{c}$ 与其在基面上的投影

它们之间的矩阵形式为：

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{a} \\ \boldsymbol{b} \\ \boldsymbol{c} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{a}_1 \\ \boldsymbol{a}_2 \\ \boldsymbol{c} \end{bmatrix} \tag{10-7}$$

前面谈到菱形晶系可以并入六方晶系，下面考察这两个基矢群之间的关系．此时将六方阵胞的 $\boldsymbol{c}$ 轴记为 $\boldsymbol{a}_3$．

图 10-4(a) 给出了六方阵胞和菱形阵胞的基矢群 $\boldsymbol{a}_1$、$\boldsymbol{a}_2$、$\boldsymbol{a}_3$ 和 $\boldsymbol{b}_1$、$\boldsymbol{b}_2$、$\boldsymbol{b}_3$．点阵的基面以 $ABC\ ABC\cdots$方式排列．如果基矢 $\boldsymbol{a}_1$、$\boldsymbol{a}_2$ 所在的层为 A 层，则 $\boldsymbol{b}_1$、$\boldsymbol{b}_2$、$\boldsymbol{b}_3$ 的指向为 B 层上的 3 个结点．图 10-4(b) 为(a)所示之点阵在基面上的投影，各结点边都标上了其相应的 $\boldsymbol{a}_3$ 轴高度． A 层的 $\boldsymbol{a}_3$ 坐标为 0、1…；B 层为 $\frac{1}{3}$、…；C 层为 $\frac{2}{3}$、…．从图 10-4 中看出，$\boldsymbol{a}_1$、$\boldsymbol{a}_2$、$\boldsymbol{a}_3$ 与 $\boldsymbol{b}_1$、$\boldsymbol{b}_2$、$\boldsymbol{b}_2$ 这

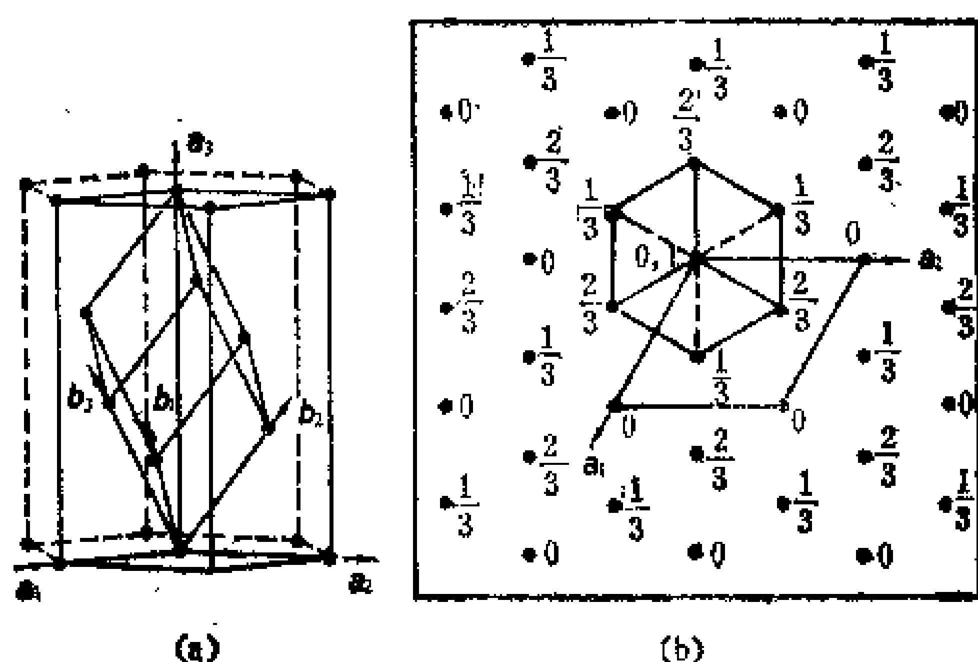


图 10-4　六方阵胞与菱形阵胞

(a)六方阵胞与菱形阵胞，两组基矢群分别记为 $\boldsymbol{a}_1$、$\boldsymbol{a}_2$、$\boldsymbol{a}_3$ 和 $\boldsymbol{b}_1$、$\boldsymbol{b}_2$、$\boldsymbol{b}_3$，点阵以 $ABCABC\cdots$方式排列，$\boldsymbol{a}_1$、$\boldsymbol{a}_2$ 在 A 层上，$\boldsymbol{b}_1$、$\boldsymbol{b}_2$、$\boldsymbol{b}_3$ 指向 B 层上的结点位置；(b)两种阵胞在基面上的投影，A、B、C 层面上的结点位置分别标以 0、$\frac{1}{3}$、$\frac{2}{3}$

两组基矢之间的关系为：

$$\boldsymbol{b}_1 = \frac{2}{3}\boldsymbol{a}_1 + \frac{1}{3}\boldsymbol{a}_2 + \frac{1}{3}\boldsymbol{a}_3$$

$$\boldsymbol{b}_2 = -\frac{1}{3}\boldsymbol{a}_1 + \frac{1}{3}\boldsymbol{a}_2 + \frac{1}{3}\boldsymbol{a}_3$$

$$\boldsymbol{b}_3 = -\frac{1}{3}\boldsymbol{a}_1 - \frac{2}{3}\boldsymbol{a}_2 + \frac{1}{3}\boldsymbol{a}_3$$

得到：

$$[s] = \frac{1}{3}\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \\ -1 & -2 & 1 \end{bmatrix} \tag{10-8}$$

二、两组倒易阵胞基矢群之间的变换

对应于正点阵中的两组基矢群 $\boldsymbol{a}_1$、$\boldsymbol{a}_2$、$\boldsymbol{a}_3$ 与 $\boldsymbol{b}_1$、$\boldsymbol{b}_2$、$\boldsymbol{b}_3$，其倒易点阵也有两组基矢群 $\boldsymbol{a}_1^*$、$\boldsymbol{a}_2^*$、$\boldsymbol{a}_3^*$与 $\boldsymbol{b}_1^*$、$\boldsymbol{b}_2^*$、$\boldsymbol{b}_3^*$。如果已知正点阵中两组基矢群之间的变换矩阵 $[s]$、$[t]$，则可以找出与它们相对应的两组倒易点阵基矢群之间的关系。

利用正、倒点阵之间的关系可以得到：

$\boldsymbol{a}_1\cdot\boldsymbol{a}_1^* + \boldsymbol{a}_2\cdot\boldsymbol{a}_2^* + \boldsymbol{a}_3\cdot\boldsymbol{a}_3^* = 3 = \boldsymbol{b}_1\cdot\boldsymbol{b}_1^* + \boldsymbol{b}_2\cdot\boldsymbol{b}_2^* + \boldsymbol{b}_3\cdot\boldsymbol{b}_3^*$，将(10-1)式代入上式，有：

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{a}_1\cdot\boldsymbol{a}_1^* + \boldsymbol{a}_2\cdot\boldsymbol{a}_2^* + \boldsymbol{a}_3\cdot\boldsymbol{a}_3^* \\
&= (s_{11}\boldsymbol{a}_1 + s_{12}\boldsymbol{a}_2 + s_{13}\boldsymbol{a}_3)\cdot\boldsymbol{b}_1^* \\
&\quad + (s_{21}\boldsymbol{a}_1 + s_{22}\boldsymbol{a}_2 + s_{23}\boldsymbol{a}_3)\cdot\boldsymbol{b}_2^* \\
&\quad + (s_{31}\boldsymbol{a}_1 + s_{32}\boldsymbol{a}_2 + s_{33}\boldsymbol{a}_3)\cdot\boldsymbol{b}_3^*
\end{aligned}$$

整理后得到：

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{a}_1^*\cdot\boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{a}_2^*\cdot\boldsymbol{a}_2 + \boldsymbol{a}_3^*\cdot\boldsymbol{a}_3 \\
&= (s_{11}\boldsymbol{b}_1^* + s_{21}\boldsymbol{b}_2^* + s_{31}\boldsymbol{b}_3^*)\cdot\boldsymbol{a}_1 \\
&\quad + (s_{12}\boldsymbol{b}_1^* + s_{22}\boldsymbol{b}_2^* + s_{32}\boldsymbol{b}_3^*)\cdot\boldsymbol{a}_2
\end{aligned}$$

$$+ (s_{13}\boldsymbol{b}_1^* + s_{23}\boldsymbol{b}_2^* + s_{33}\boldsymbol{b}_3^*) \cdot \boldsymbol{a}_3$$

比较上式两边的系数，可以得到：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{a}_1^* &= s_{11}\boldsymbol{b}_1^* + s_{21}\boldsymbol{b}_2^* + s_{31}\boldsymbol{b}_3^* \\ \boldsymbol{a}_2^* &= s_{12}\boldsymbol{b}_1^* + s_{22}\boldsymbol{b}_2^* + s_{32}\boldsymbol{b}_3^* \\ \boldsymbol{a}_3^* &= s_{13}\boldsymbol{b}_1^* + s_{23}\boldsymbol{b}_2^* + s_{33}\boldsymbol{b}_3^* \end{aligned} \tag{10-9}$$

即有：

$$[\boldsymbol{a}^*] = [\tilde{s}][\boldsymbol{b}^*] \tag{10-10}$$

同理可得：

$$[\boldsymbol{b}^*] = [\tilde{t}][\boldsymbol{a}^*] \tag{10-11}$$

其中$[\tilde{s}]$与$[\tilde{t}]$分别为$[s]$与$[t]$的转置矩阵。

让我们以面心立方阵胞与其原胞之间的关系为例，寻求它们对应的倒易阵胞基矢之间的关系。

根据(10-5)式可以得到 $\boldsymbol{a}_1^*$、$\boldsymbol{a}_2^*$、$\boldsymbol{a}_3^*$与 $\boldsymbol{b}_1^*$、$\boldsymbol{b}_2^*$、$\boldsymbol{b}_3^*$之间的变换矩阵。

$$[\tilde{s}] = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} \tag{10-12}$$

所以：

$$\boldsymbol{a}_1^* = \frac{1}{2}(\boldsymbol{b}_1^* + \boldsymbol{b}_3^*)$$

$$\boldsymbol{a}_2^* = \frac{1}{2}(\boldsymbol{b}_1^* + \boldsymbol{b}_2^*)$$

$$\boldsymbol{a}_3^* = \frac{1}{2}(\boldsymbol{b}_2^* + \boldsymbol{b}_3^*)$$

于是可以解出：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{b}_1^* &= \boldsymbol{a}_1^* + \boldsymbol{a}_2^* - \boldsymbol{a}_3^* \\ \boldsymbol{b}_2^* &= -\boldsymbol{a}_1^* + \boldsymbol{a}_2^* + \boldsymbol{a}_3^* \\ \boldsymbol{b}_3^* &= \boldsymbol{a}_1^* - \boldsymbol{a}_2^* + \boldsymbol{a}_3^* \end{aligned}$$

由于面心立方阵胞的加权倒易阵胞的棱长为 $2\boldsymbol{a}^*$，记 $2\boldsymbol{a}^* = \boldsymbol{A}_i^*$，

有：

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{b}_1^* \\ \boldsymbol{b}_2^* \\ \boldsymbol{b}_3^* \end{bmatrix} = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \boldsymbol{A}_1^* \\ \boldsymbol{A}_2^* \\ \boldsymbol{A}_3^* \end{bmatrix} \qquad (10\text{-}13)$$

(10-12) 式与体心立方阵胞与其原胞基矢群之间的变换关系(10-6)式相同。

三、对应两组基矢群对阵胞内几何元素指数的变换

（一）晶面指数的变换

设正点阵中有某一平面，它在两组基矢 $\boldsymbol{a}_1$、$\boldsymbol{a}_2$、$\boldsymbol{a}_3$和 $\boldsymbol{b}_1$、$\boldsymbol{b}_2$、$\boldsymbol{b}_3$中的指数分别为 $(h_1k_1l_1)$ 和 $(h_2k_2l_2)$，已知两基矢群之间的变换矩阵为 $[s]$、$[t]$。下面寻求 $(h_1k_1l_1)$ 与 $(h_2k_2l_2)$ 之间的关系。

$(h_1k_1l_1)$ 与 $(h_2k_2l_2)$ 为同一晶面在同一点阵的两种阵胞内的指数。于是与它们相应的倒易矢 $\boldsymbol{g}_1 = h_1\boldsymbol{a}_1^* + k_1\boldsymbol{a}_2^* + l_1\boldsymbol{a}_3^*$ 与 $\boldsymbol{g}_2 = h_2\boldsymbol{b}_1^* + k_2\boldsymbol{b}_2^* + l_2\boldsymbol{b}_3^*$ 是同一方向在不同倒易基矢群中的表示，所以有 $\boldsymbol{g}_1 = \boldsymbol{g}_2$，即：

$$h_1\boldsymbol{a}_1^* + k_1\boldsymbol{a}_2^* + l_1\boldsymbol{a}_3^* = h_2\boldsymbol{b}_1^* + k_2\boldsymbol{b}_2^* + l_2\boldsymbol{b}_3^*$$

将(10-11)式代入，得：

$$\begin{aligned} & h_1\boldsymbol{a}_1^* + k_1\boldsymbol{a}_2^* + l_1\boldsymbol{a}_3^* \\ &= (t_{11}\boldsymbol{a}_1^* + t_{21}\boldsymbol{a}_2^* + t_{31}\boldsymbol{a}_3^*)h_2 \\ &\quad + (t_{12}\boldsymbol{a}_1^* + t_{22}\boldsymbol{a}_2^* + t_{32}\boldsymbol{a}_3^*)k_2 \\ &\quad + (t_{13}\boldsymbol{a}_1^* + t_{23}\boldsymbol{a}_2^* + t_{33}\boldsymbol{a}_3^*)l_2 \\ &= (t_{11}h_2 + t_{12}k_2 + t_{13}l_2)\boldsymbol{a}_1^* \\ &\quad + (t_{21}h_2 + t_{22}k_2 + t_{23}l_2)\boldsymbol{a}_2^* \\ &\quad + (t_{31}h_2 + t_{32}k_2 + t_{33}l_2)\boldsymbol{a}_3^* \end{aligned}$$

比较上式两边的系数，得到：

$$h_1 = t_{11}h_2 + t_{12}k_2 + t_{13}l_2$$
$$k_1 = t_{21}h_2 + t_{22}k_2 + t_{23}l_2$$
$$l_1 = t_{31}h_2 + t_{32}k_2 + t_{33}l_2$$

即：

$$\begin{bmatrix} h_1 \\ k_1 \\ l_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} t_{11} & t_{12} & t_{13} \\ t_{21} & t_{22} & t_{23} \\ t_{31} & t_{32} & t_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h_2 \\ k_2 \\ l_2 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} h_1 \\ k_1 \\ l_1 \end{bmatrix} = [t] \begin{bmatrix} h_2 \\ k_2 \\ l_2 \end{bmatrix} \tag{10-14}$$

同样的方式可以得到：

$$\begin{bmatrix} h_2 \\ k_2 \\ l_2 \end{bmatrix} = [s] \begin{bmatrix} h_1 \\ k_1 \\ l_1 \end{bmatrix} \tag{10-15}$$

比较(10-4)式与(10-14)式和(10-3)式与(10-15)式可以看出，在两组基矢中同一晶面的晶面指数之间的变换关系与这两组基矢之间的变换关系相同。

例如某一晶面在六方晶系中的指数为 (hkl)，在正交晶系中指数为 (efg)，则根据(10-7)式得到：

$$\begin{bmatrix} e \\ f \\ g \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}$$

同理，如果一个晶面在六方阵胞中的指数为 (hkl)，在菱形阵胞中指数为 (HKL)，则根据(10-8)式有：

$$\begin{bmatrix} H \\ K \\ L \end{bmatrix} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \\ -1 & -2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}$$

于是六方阵胞中的(101)面为菱形阵胞中的(100)面，六方阵胞中

的(110)面为菱形阵胞中的$(10\bar{1})$面。

(二) 点的坐标与方向指数的变换

设在某一正点阵中有一特定点或方向，它们在该点阵的两组基矢群中的指数分别为 $u_1v_1w_1$、$u_2v_2w_2$ 或 $[u_1v_1w_1]$、$[u_2v_2w_2]$，两基矢群之间的变换矩阵为 $[s]$、$[t]$。下面寻求 $u_1v_1w_1$ 与 $u_2v_2w_2$ 之间的关系。

$[u_1v_1w_1]$ 与 $[u_2v_2w_2]$ 为一个方向在同一点阵中的两种阵胞内的表达形式，于是它们对应的平移矢 $\boldsymbol{r}_1 = u_1\boldsymbol{a}_1 + v_1\boldsymbol{a}_2 + w_1\boldsymbol{a}_3$，$\boldsymbol{r}_2 = u_2\boldsymbol{b}_1 + v_2\boldsymbol{b}_2 + w_2\boldsymbol{b}_3$ 应有 $\boldsymbol{r}_1 = \boldsymbol{r}_2$，即：

$$u_1\boldsymbol{a}_1 + v_1\boldsymbol{a}_2 + w_1\boldsymbol{a}_3 = u_2\boldsymbol{b}_1 + v_2\boldsymbol{b}_2 + w_2\boldsymbol{b}_3$$

将(10-1)式代入，得：

$$\begin{aligned}
&u_1\boldsymbol{a}_1 + v_1\boldsymbol{a}_2 + w_1\boldsymbol{a}_3 \\
&\quad = (s_{11}\boldsymbol{a}_1 + s_{12}\boldsymbol{a}_2 + s_{13}\boldsymbol{a}_3)u_2 \\
&\qquad + (s_{21}\boldsymbol{a}_1 + s_{22}\boldsymbol{a}_2 + s_{23}\boldsymbol{a}_3)v_2 \\
&\qquad + (s_{31}\boldsymbol{a}_1 + s_{32}\boldsymbol{a}_2 + s_{33}\boldsymbol{a}_3)w_2 \\
&\quad = (s_{11}u_2 + s_{21}v_2 + s_{31}w_2)\boldsymbol{a}_1 \\
&\qquad + (s_{12}u_2 + s_{22}v_2 + s_{32}w_2)\boldsymbol{a}_2 \\
&\qquad + (s_{13}u_2 + s_{23}v_2 + s_{33}w_2)\boldsymbol{a}_3
\end{aligned}$$

比较两边系数，得到：

$$\begin{aligned}
u_1 &= s_{11}u_2 + s_{21}v_2 + s_{31}w_2 \\
v_1 &= s_{12}u_2 + s_{22}v_2 + s_{32}w_2 \\
w_1 &= s_{13}u_2 + s_{23}v_2 + s_{33}w_2
\end{aligned}$$

即：

$$\begin{bmatrix} u_1 \\ v_1 \\ w_1 \end{bmatrix} = [\tilde{s}] \begin{bmatrix} u_2 \\ v_2 \\ w_2 \end{bmatrix} \tag{10-16}$$

同理可以获得：

$$\begin{bmatrix} u_2 \\ v_2 \\ w_2 \end{bmatrix} = [i] \begin{bmatrix} u_1 \\ v_1 \\ w_1 \end{bmatrix} \qquad (10-17)$$

比较(10-10)与(10-16)式和(10-11)与(10-17)式可以看出，在同一点阵的两组基矢中，某一点或方向指数之间的变换关系与这两组基矢的对应的倒易基矢之间的变换关系相同。

四、应用举例

(一)六方晶系中的方向指数

第三章中我们已经谈到，在一般情况下，可以用图 10-5 所示的 $\boldsymbol{b}_1$、$\boldsymbol{b}_2$、$\boldsymbol{c}$ 坐标系，按常规方法直接定出四指数 [$uvtw$] 中的三指数 u、v、w，再按 $t=-(u+v)$ 计算出 t，就方便地获得了方向的米勒-布拉维指数。同时谈到 $\boldsymbol{b}_1$、$\boldsymbol{b}_2$、$\boldsymbol{c}$ 坐标系与 $\boldsymbol{a}_1$、$\boldsymbol{a}_2$、$\boldsymbol{c}$ 坐标系加公式(3-2)等价。下面让我们从坐标变换的角度来给以证明。

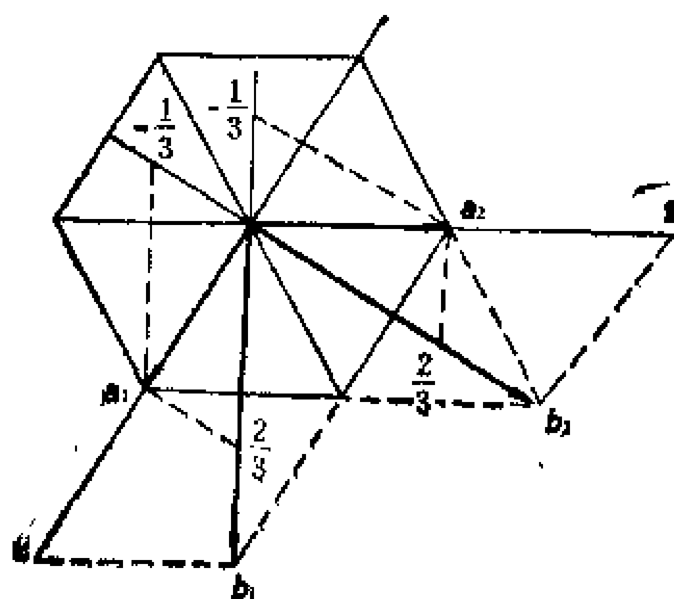


图 10-5　六方晶系中的 $\boldsymbol{a}_1$、$\boldsymbol{a}_2$、$\boldsymbol{c}$ 与 $\boldsymbol{b}_1$、$\boldsymbol{b}_2$、$\boldsymbol{c}$ 坐标系之间的关系，$-\frac{1}{3}$、$\frac{2}{3}$…等数字分别标明两坐标之间的投影

图 10-5 可以看出 $\boldsymbol{a}_1$、$\boldsymbol{a}_2$、$\boldsymbol{c}$ 与 $\boldsymbol{b}_1$、$\boldsymbol{b}_2$、$\boldsymbol{c}$ 两坐标系之间的关系为:

$$\boldsymbol{b}_1 = 2\boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{a}_2$$
$$\boldsymbol{b}_2 = \boldsymbol{a}_1 + 2\boldsymbol{a}_2$$
$$\boldsymbol{c} = \boldsymbol{c}$$

即:

$$[s] = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = [\tilde{s}]$$

$$\boldsymbol{a}_1 = \frac{1}{3}(2\boldsymbol{b}_1 - \boldsymbol{b}_2)$$

$$\boldsymbol{a}_2 = \frac{1}{3}(-\boldsymbol{b}_1 + 2\boldsymbol{b}_2)$$

$$\boldsymbol{c} = \boldsymbol{c}$$

即:

$$[t] = \frac{1}{3}\begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = [\tilde{t}]$$

如果 $\boldsymbol{a}_1$、$\boldsymbol{a}_2$、$\boldsymbol{c}$ 坐标系中的方向指数记为 $[UVW]$，$\boldsymbol{b}_1$、$\boldsymbol{b}_2$、$\boldsymbol{c}$ 坐标系中的方向指数记为 $[uvtw]$，则按(10-16)与(10-17)式有:

$$\begin{bmatrix} U \\ V \\ W \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}$$

即有(3-1)式:

$$U = 2u + v$$
$$V = u + 2v$$
$$W = w$$

而:

$$\begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} = \frac{1}{3}\begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} U \\ V \\ W \end{bmatrix}$$

即有(3-2)式:

$$u = \frac{1}{3}(2U - V)$$

$$v = \frac{1}{3}(2V - U)$$

$$w = W$$

（二）判断加权倒易点阵中结点的指数规律

对于同一点阵来说，可以取原胞，也可以取复胞．对于原胞来说，其倒易点阵中所有结点的结构因数权重都不为零；而对于复胞，其加权倒易点阵中只能出现一定指数规律的结点．设原胞的坐标为 $\boldsymbol{b}_1$、$\boldsymbol{b}_2$、$\boldsymbol{b}_3$，晶面指数为 $(h_2k_2l_2)$，复胞中的坐标为 $\boldsymbol{a}_1$、$\boldsymbol{a}_2$、$\boldsymbol{a}_3$，晶面指数为 $(h_1k_1l_1)$，它们相应的倒易结点指数自然分别为 $h_2k_2l_2$ 与 $h_1k_1l_1$．已知 $h_2k_2l_2$ 可以是任意整数，下面从坐标变换的角度寻求 $h_1k_1l_1$ 的指数规律，即求变换矩阵 $[t]$．

1. 体心复胞的加权倒易点阵中的结点指数

图 10-6 给出同一点阵的体心复胞(粗实线)和原胞(粗虚线)，以及它们的基矢群 $\boldsymbol{a}_1$、$\boldsymbol{a}_2$、$\boldsymbol{a}_3$ 和 $\boldsymbol{b}_1$、$\boldsymbol{b}_2$、$\boldsymbol{b}_3$．从图中看出，两者之间的关系为:

$$\boldsymbol{a}_1 = \boldsymbol{b}_1$$

$$\boldsymbol{a}_2 = \boldsymbol{b}_2$$

$$\boldsymbol{a}_3 = \boldsymbol{b}_1 + \boldsymbol{b}_2 + 2\boldsymbol{b}_3$$

于是:

$$[t] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix}$$

它表明同一晶面在复胞内指数 $(h_1k_1l_1)$ 与在原胞内指数 $(h_2k_2l_2)$

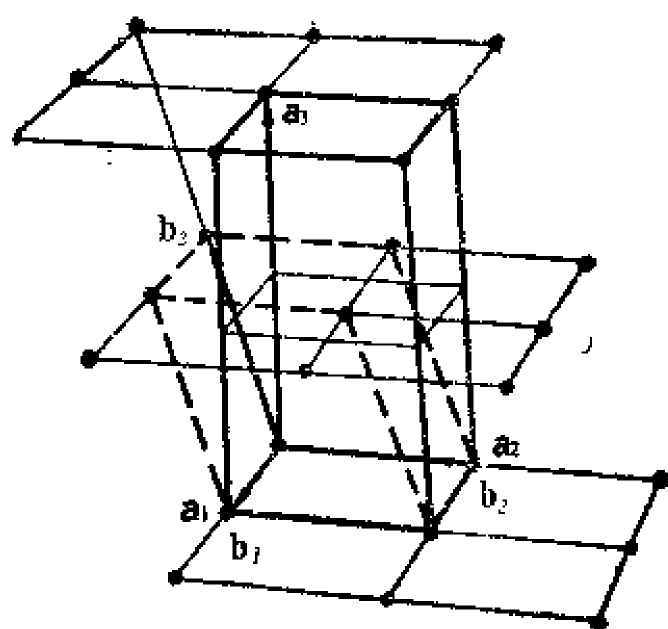


图 10-6 原胞(粗虚线)与体心复胞(粗实线)和它们的基矢群 b_1、b_2、b_3 与 a_1、a_2、a_3

之间的关系为:

$$\begin{bmatrix} h_1 \\ k_1 \\ l_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h_2 \\ k_2 \\ l_2 \end{bmatrix}$$

即

$$h_1 = h_2$$
$$k_1 = k_2$$
$$l_1 = h_2 + k_2 + 2l_2$$

将上列三式相加,得出:

$$h_1 + k_1 + l_1 = 2(h_2 + k_2 + l_2)$$

由于 h_2、k_2、l_2 为任意整数,所以在体心复胞的加权倒易点阵中,结点指数 $h_1k_1l_1$ 之和必为偶数.

2. 面心复胞的加权倒易点阵中的结点指数

图 10-7 给出面心复胞(粗实线)与原胞(粗虚线)和它们的基矢群 a_1、a_2、a_3 和 b_1、b_2、b_3, 为清楚起见只画出三层点阵上的平

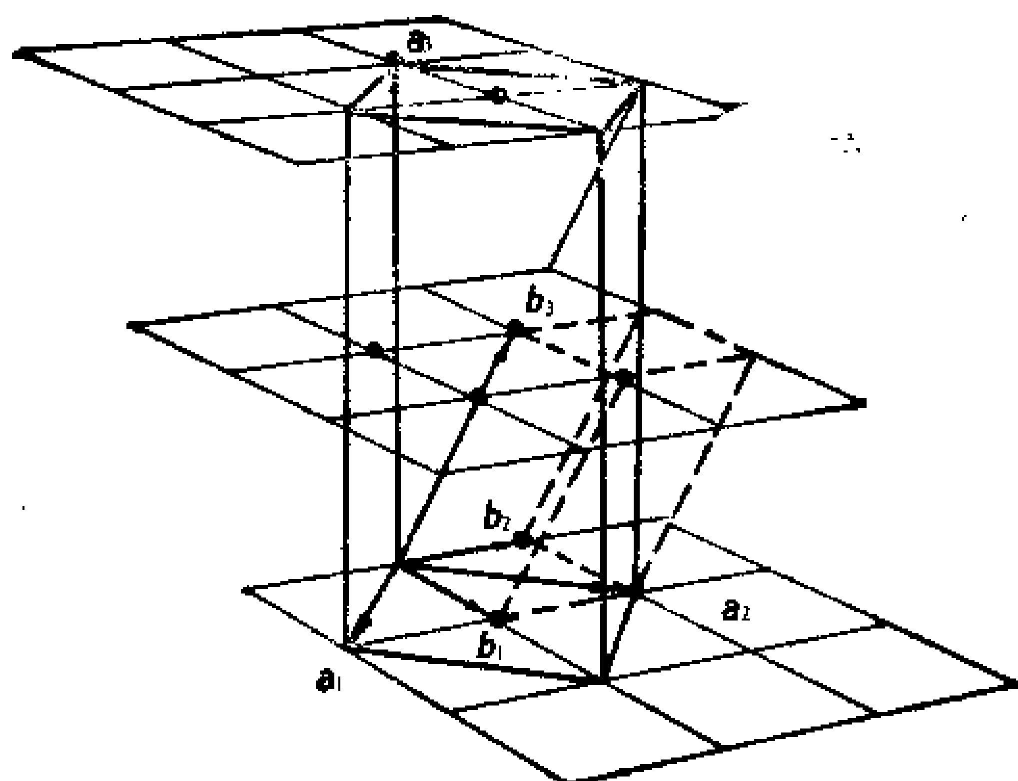


图 10-7 面心复胞(粗实线)与原胞(粗虚线)和它们的基矢群 $\boldsymbol{a}_1$、$\boldsymbol{a}_2$、$\boldsymbol{a}_3$ 与 $\boldsymbol{b}_1$、$\boldsymbol{b}_2$、$\boldsymbol{b}_3$，图中只给出了处在面心位置上的结点

行四边形，只有少数处在面心上的结点．从图中看出，两个基矢群之间的关系为：

$$\boldsymbol{a}_1 = \boldsymbol{b}_1 - \boldsymbol{b}_2$$

$$\boldsymbol{a}_2 = \boldsymbol{b}_1 + \boldsymbol{b}_2$$

$$\boldsymbol{a}_3 = \boldsymbol{b}_1 + \boldsymbol{b}_2 + 2\boldsymbol{b}_3$$

即：

$$[t] = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix}$$

于是：

$$\begin{bmatrix} h_1 \\ k_1 \\ l_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h_2 \\ k_2 \\ l_2 \end{bmatrix}$$

则:

$$h_1 = h_2 - k_2$$
$$k_1 = h_2 + k_2$$
$$l_1 = h_2 + k_2 + 2l_2$$

可以得到:

$$h_1 + k_1 = 2h_2$$
$$h_1 + l_1 = 2(h_2 + l_2)$$
$$k_1 + l_1 = 2(h_2 + k_2 + l_2)$$

由于 h_2、k_2、l_2 为任意整数,所以 h_1、k_1、l_1 必是同奇或同偶。

所以,面心复胞的加权倒易点阵中结点的指数必须是同奇或同偶。

练 习 题

1. 如图 10-8 所示,六方点阵可以取成三种不同取向的正交阵胞,它们的第三轴都相同。请分别写出这些正交阵胞与六方阵胞之间的坐标变换矩阵。

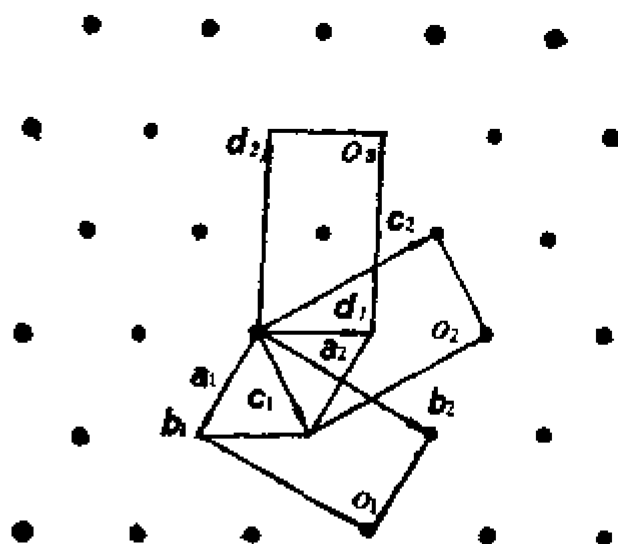


图 10-8 六方点阵中的六方阵胞 a_1、a_2、c 与三个取向不同的正交阵胞 O_1、O_2、O_3,它们的基矢群分别为 b_1、b_2、c,c_1、c_2、c 和 d_1、d_2、c

2. 图 10-9 在同一点阵中给出了两组基矢 $\boldsymbol{a}_1$、$\boldsymbol{a}_2$、$\boldsymbol{a}_3$ 和 $\boldsymbol{b}_1$、$\boldsymbol{b}_2$、$\boldsymbol{b}_3$，其中 $\boldsymbol{a}_3=\boldsymbol{b}_3$ 且垂直于纸面。请写出它们之间的坐标变换关系，平行于 $\boldsymbol{a}_3$ 轴的面 MN 在两坐标内的指数和 P 点的坐标。

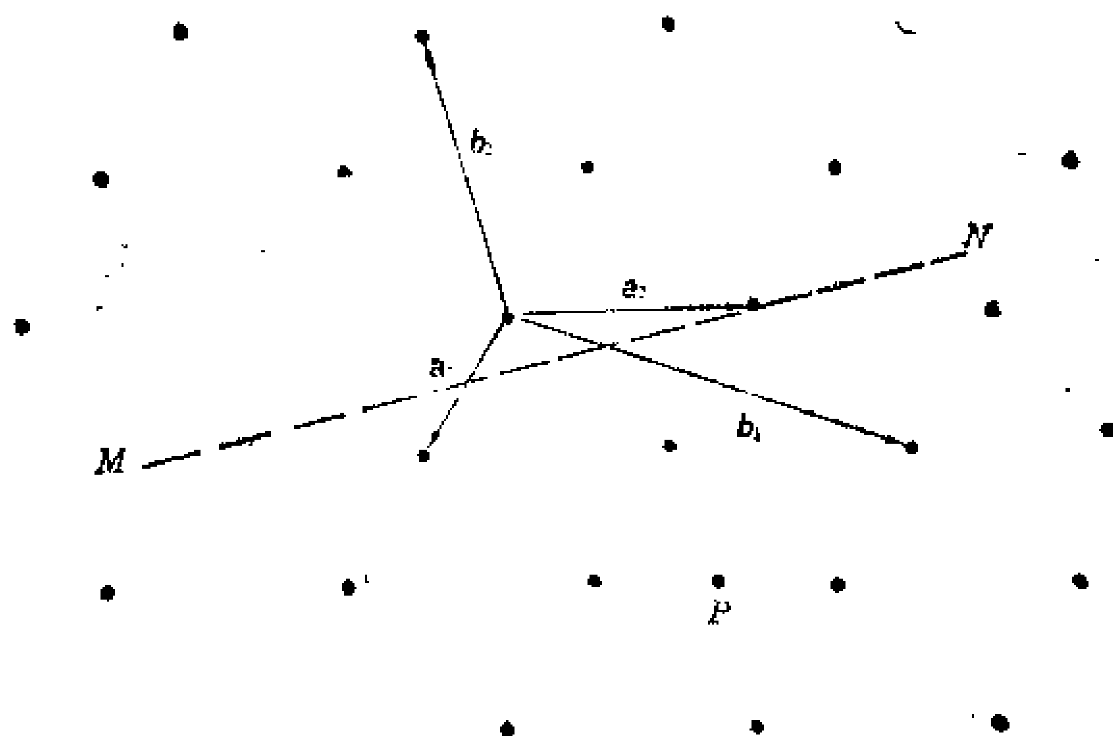


图 10-9 点阵中的两个基矢群 $\boldsymbol{a}_1$、$\boldsymbol{a}_2$、$\boldsymbol{a}_3$ 与 $\boldsymbol{b}_1$、$\boldsymbol{b}_2$、$\boldsymbol{b}_3$，且 $\boldsymbol{b}_3=\boldsymbol{a}_3$ 并垂直于纸面，平面 MN 也垂直于纸面，P 为点阵内的一点

3. 请用坐标变换方法求底心复胞的加权倒易点阵中结点的指数规律。

4. 请写出以对称心和二次轴所联系的坐标系之间的变换矩阵。

复　习　题

1. 请写出两坐标之间关系与变换矩阵的一般式。

2. 请说明两坐标系与它们对应的两倒易坐标系之间的变换关系有何联系？

3. 请说明同一晶面在两坐标系中的指数关系如何?

4. 请说明同一方向在两坐标系中的指数关系如何?

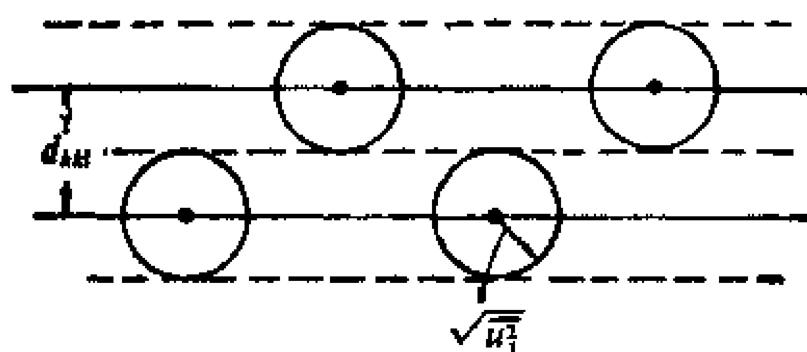
5. 请说明可以用坐标变换求得复胞加权倒易点阵结点指数规律的理由。

附　　录

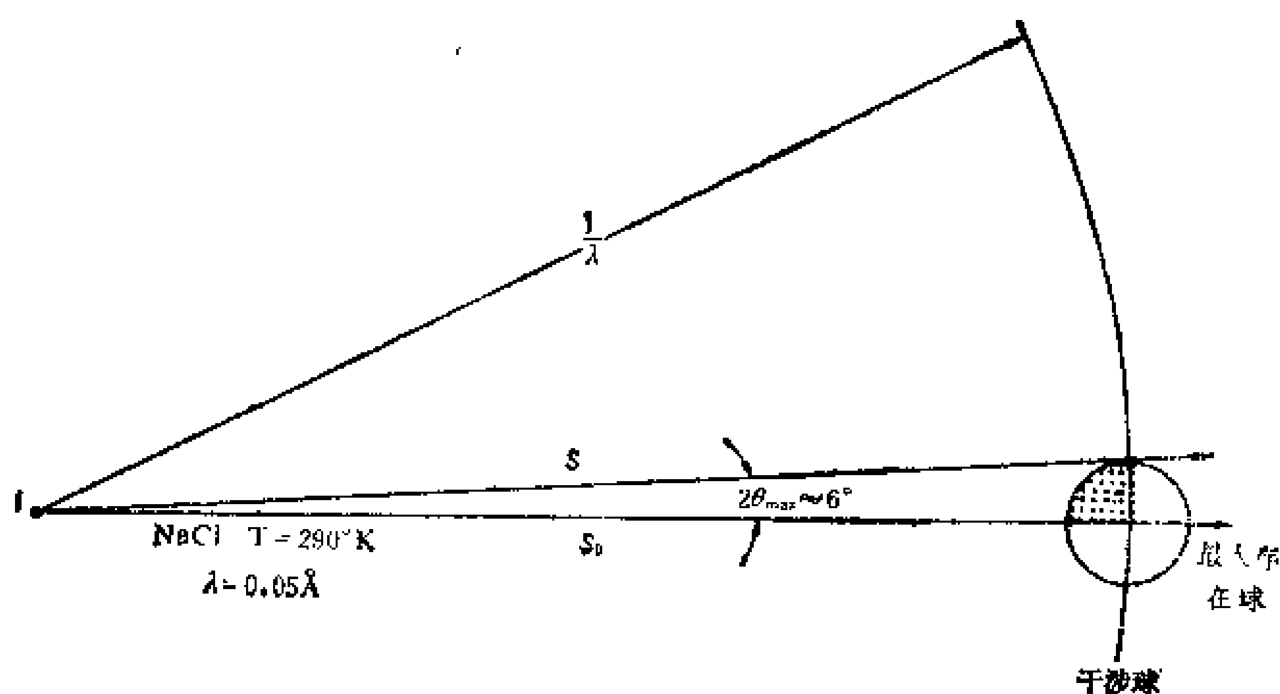
附录一　电子衍射图的角范围

电子衍射一般只能记录 $\theta \leqslant 5°$的衍射斑，这里给出如下简单解释。

晶体中的原子，不停地以其平衡位置为中心而振动，称此为热运动，可以用晶体中原子相对其平衡位置位移的均方值 $\overline{u^2}$ 描述其运动范围。如果用$\sqrt{\overline{u^2}}$表示原子相对平衡位置的位移，如图附-1 所示，则当面间距 $d_{hkl} \leqslant 2\sqrt{\overline{u^2}}$ 时，由于热运动的影响，使两平面不可分辨，因此这种晶面的倒易结点即使与爱瓦德球相交，也不会产生衍射线束。于是，可以认为在倒易点阵中，有一个以倒易原点为心，$1/(2\sqrt{\overline{u^2}})$为半径的球，称为最大存在球，只有在球内的倒易结点与爱瓦德球相交才能产生衍射线。由于电子衍射时，电子波长 λ 一般较短，所以最大存在球与爱瓦德球交线只在 θ 角很小的范围内，如图附-2 所示。例如以 55KV 电压的测 NaCl 衍射谱时，$\lambda = 0.05$ Å，$T = 290$°K 时，可以查出 $\sqrt{\overline{u^2}} = 0.23$ Å，所以由 $2d\sin\theta = \lambda$ 可以算出当 $d = 0.23$ Å时的 θ 角为 3° 左右。



图附-1　$d_{hkl} = 2\sqrt{\overline{u^2}}$ 的情况



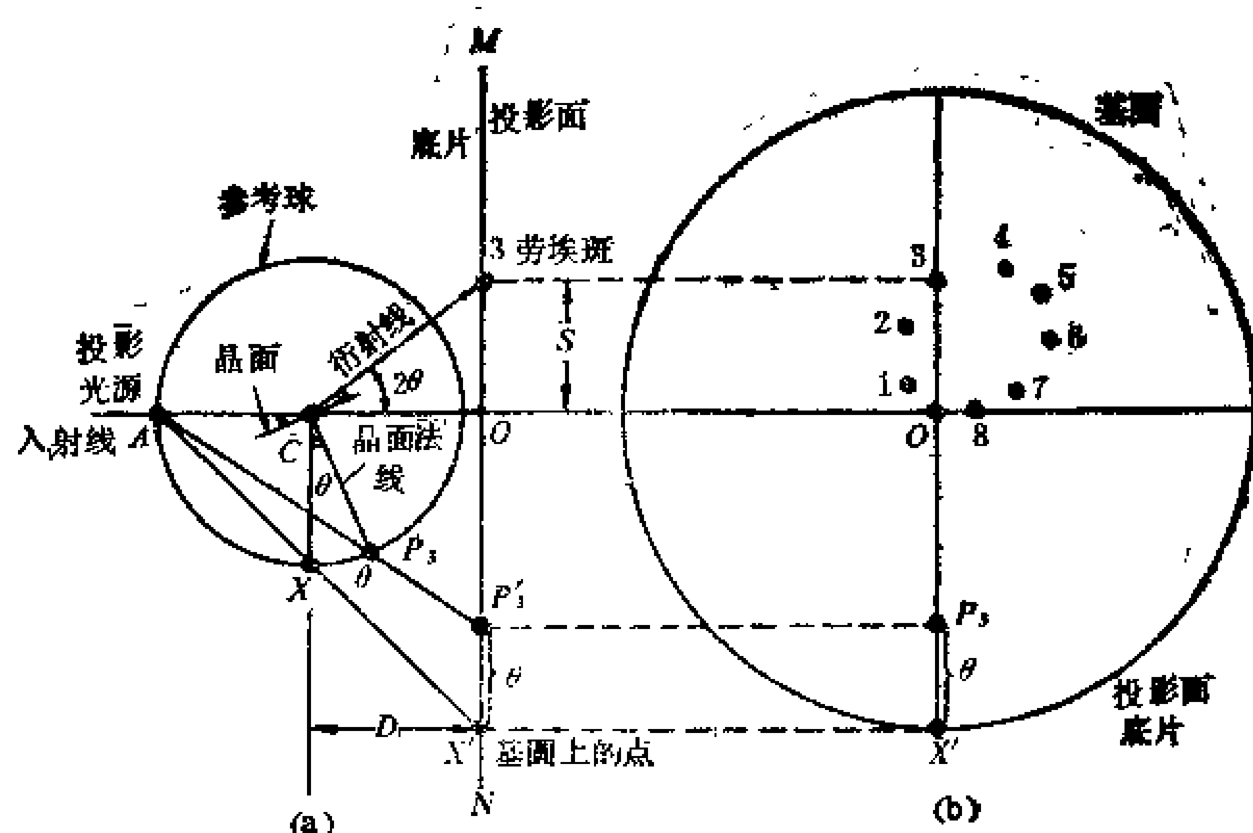
图附-2　电子衍射中的最大存在球

附录二　晶面的衍射斑与极点之间的关系

讨论晶面的衍射斑与极点之间的几何关系有助于理解单晶图样各种解法，并且方便于借助算机来解衍射图谱。

一、图解法

所调图解法，就是利用衍射几何——晶面反射概念——和极射投影几何，直接寻找照片上记录的衍射斑与衍射晶面极点之间的关系．现在以透射劳埃斑与其极点之间的关系加以说明．为此，将极射投影与照片重在一起，如图附-3 所示，让极射投影中心与劳埃照片的入射斑相一致，如图附-3(b)所示，(b) 为 (a)的侧视图．把晶体 C 放在参考球中心，于是某晶面的衍射线和晶面法线都从 C 发出．投影光源在参考球面上的 A 点，X 光入射线也是由 A 点射向晶体，投影面和底片相重合，记为 MN．图中示出了某一晶面，它的衍射线与底片相交形成劳埃斑 3，X 光入射线与底片



图附-3　劳埃斑与衍射面极点之间的关系

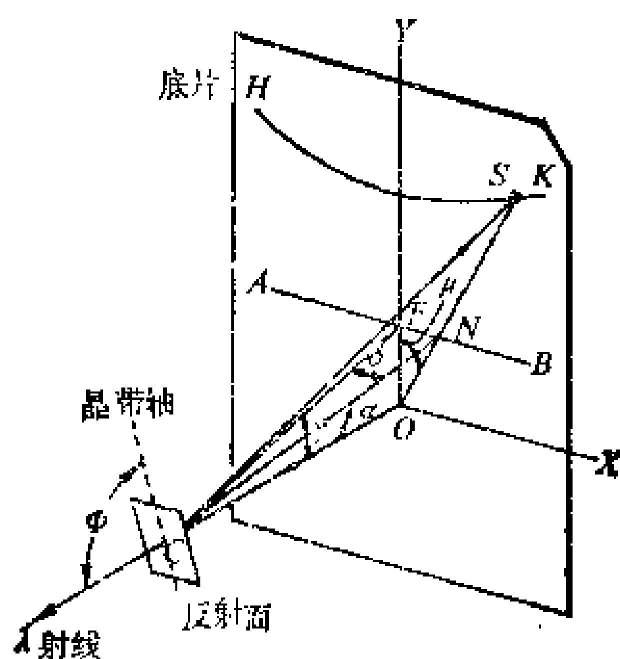
的交点为 O。与劳埃斑 3 对应的晶面法线和参考球交于 P_3，其极射投影为 P'_3。因为入射线、衍射线和晶面法线在同一平面内，所以劳埃斑 3 与其对应的晶面极点 P'_3应在过 O 点的一条直线上，如图附-3(b)所示。同时，从图附-3(a) 中看出 P'_3 与基圆之间的夹角为 θ，θ 为布拉格角。

这就是透射劳埃斑与其晶面极点之间的几何关系。对于背射劳埃法，也可以作相似的处理，获得相似的几何关系。

二、变换网法

变换网法是利用衍射几何与投影几何找到衍射斑坐标与其反射面极点方位角之间的关系。对应具体的照相方法，作出由衍射斑坐标直接读出极点方位角的网格。例如有用于透射劳埃法的梁氏网及用于背射劳埃法的格氏网等。下面以格氏网为例加以说明。

在背射劳埃照片上．所有衍射斑都在一条条双曲线上，每一条双曲线上的斑都是由属于同一个晶带的晶面反射的．图附-4 给出了某一晶带的背射劳埃斑与其晶面法线，即心射投影点之间的关系．为了清楚起见，画面上省去了参考球，且只画出了产生衍射斑 S 的一组晶面．参考球心、晶体和投影光源皆在 C 处．晶带轴由虚线所示，与入射线呈 Φ 角，底片和投影面在一起，与参考球相切于 O，底片上记录了此晶带的衍射斑，它们在双曲线 HK 上．产生衍射斑 S 的晶面，其法线与投影面交于 N，即该晶面的心射投影点为 N．对应衍射斑 HK 的心射投影点为直线 AB．下面寻找衍射斑坐标与其晶面极点之间的关系．为此，以照片和投影面的共同中心 O 为原点，建立直角坐标系 XOY，让 OY 与所分析的晶带双曲线 HK 正交．于是衍射斑 S 的位置由其在直角坐标系中的坐标 x、y 描述．极点的方位角由 γ 和 δ 表示，它们分别是极点的经纬度．记 OY 与 AB 的交点为 F，OF 与 ON 之间夹角为 μ，OC 与 ON 之间夹角为 ϕ，于是：



图附-4　某晶带的衍射斑 HK 和心射投影点 AB，以及衍射斑 S 的极射投影点的方位角 γ、δ

$$x = OS\sin\mu$$

$$y = OS\cos\mu$$

$$OS = OC\,\mathrm{tg}2\phi$$

$$\mathrm{tg}\phi = \frac{ON}{OC} = \frac{(FN/\sin\mu)}{OC} = \frac{(CF\,\mathrm{tg}\delta/\sin\mu)}{CF\cos\gamma} = \frac{\mathrm{tg}\,\delta}{\cos\gamma\sin\mu}$$

$$\mathrm{tg}\,\mu = \frac{FN}{FO} = \frac{CF\,\mathrm{tg}\,\delta}{CF\sin\gamma} = \frac{\mathrm{tg}\,\delta}{\sin\gamma}$$

利用上述关系，在给定照相距离 OC 时，可以计算晶面极点的方位角 γ、δ 与其衍射斑位置 x、y 之间的关系。1935 年格伦林格（Greninger,A.B.）利用这种关系作出如图附-5(a)所示的格氏网。利用它，可以直接从照片上的衍射斑坐标（x、y）读出其极点的方位角 γ、δ。图附-5 给出了利用格氏网将衍射斑 P 转化为极射投影点 P_s 和心射投影点 P_g 的方法。

三、衍射斑、心射极点和极射极点在直角坐标系内的坐标关系

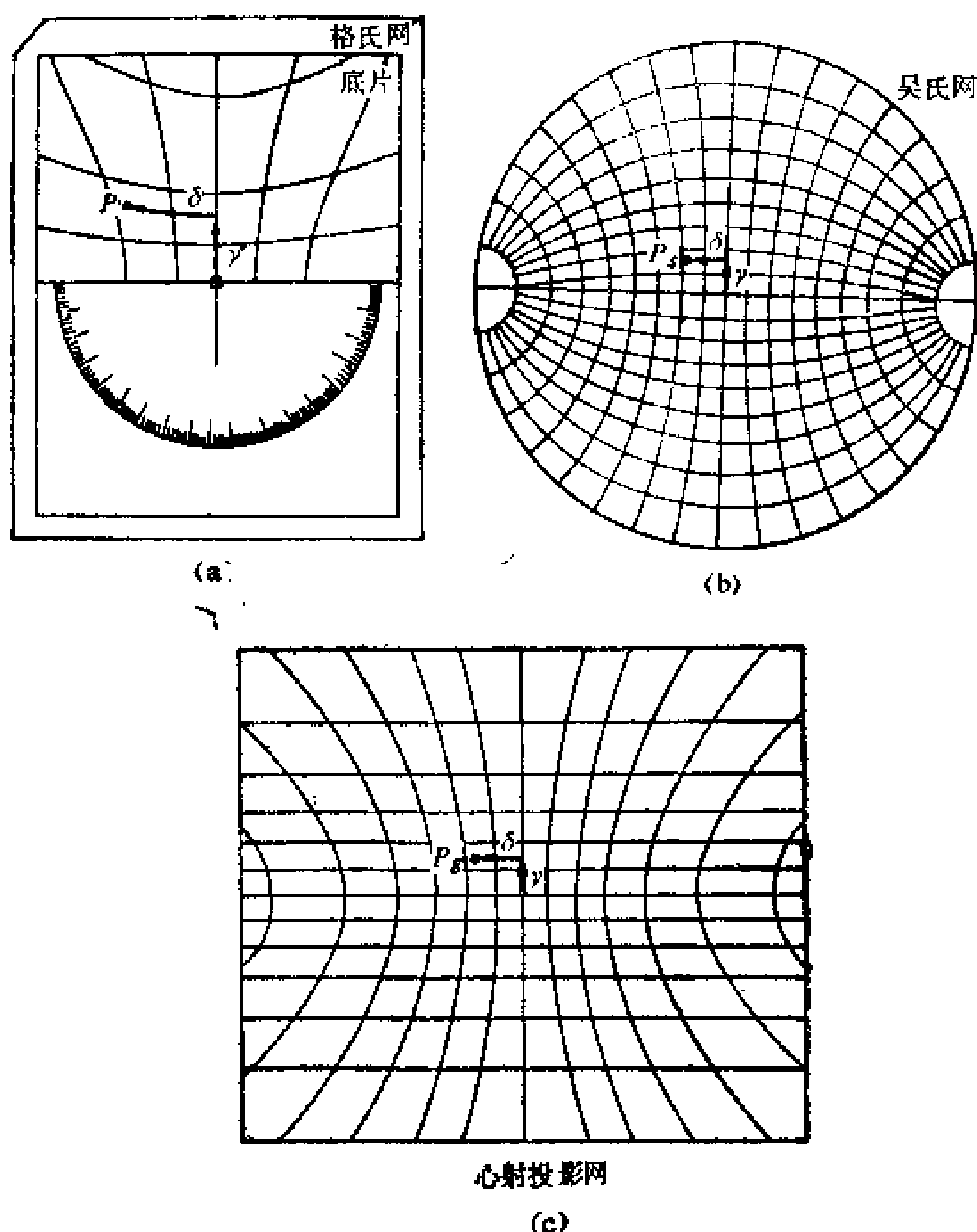
在计算机标定劳埃斑指数和绘制标准投影时，有时要用到衍射斑、心射投影点、极射投影点之间在直角坐标系内的坐标关系。

图附-6 给出背射劳埃照片与心射投影点之间的关系。图中 C 为晶体、P 为背射劳埃斑，N 是与 P 对应的晶面法线与投影面的交点，即心射投影点。过底片（也为投影面）的中心作直角坐标 XOY，记 P 点的坐标为 x_d、y_d，N 点的坐标为 x_g、y_g，由图可以看出它们之间的关系为：

$$\frac{x_g}{x_d} = \frac{ON}{OP} = \frac{CO\,\mathrm{tg}\,\phi}{OP} = \frac{CO}{OP}\left(\frac{\sin 2\phi}{1+\cos 2\phi}\right)$$

$$= \frac{CO}{OP}\left(\frac{OP}{CP}\right)\bigg/\left(1+\frac{CO}{CP}\right)$$

其中 CO 为试样到底片的距离，记为 D，x_d、y_d 为衍射斑坐标，可



(a)

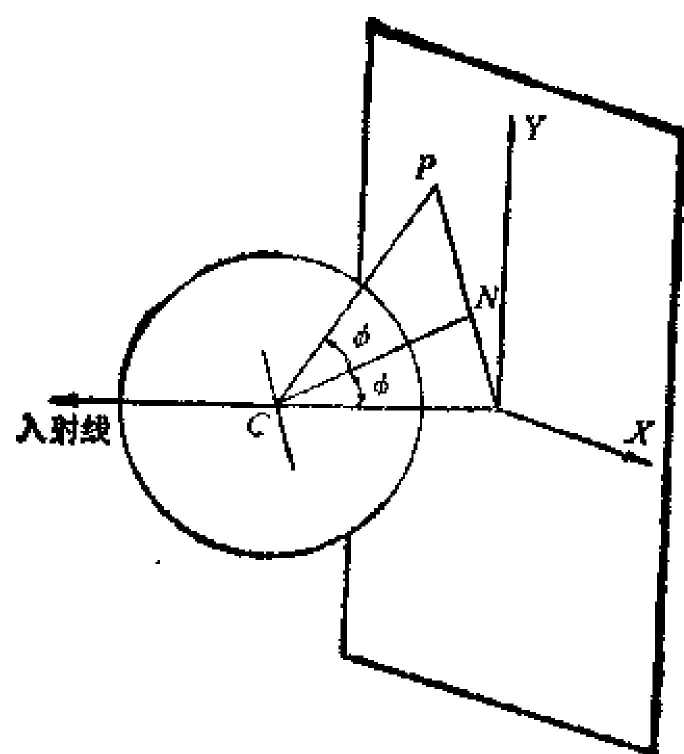
(b)

心射投影网

(c)

图附-5 格氏网的使用

(a) 用格氏网测量背射劳埃照片；(b)将衍射斑 P 转化为极射投影点 P_s；(c)将衍射斑转化为心射投影点 P_g



图附-6　背射劳埃斑与心射投影点之间的关系

以在底片上测出，从而得到：

$$x_g = \frac{D}{D + \sqrt{x_d^2 + y_d^2 + D^2}} x_d$$

$$y_g = \frac{D}{D + \sqrt{x_d^2 + y_d^2 + D^2}} y_d \qquad (附\text{-}1)$$

以同样的方法，能够获得透射法中劳埃斑与心射投影之间的关系，由图附-7 可以看出有：

$$\frac{x_g}{x_d} = -\frac{ON}{OP} = -\frac{CO}{OP}\text{ctg}\theta = -\frac{CO}{OP}\frac{\sin 2\theta}{1-\cos 2\theta}$$

$$= \frac{CO}{OP}\frac{OP}{CP}\Big/\left(1-\frac{CO}{CP}\right) = -\frac{CO}{CP-CO}$$

从而有

$$x_g = \frac{D}{-\sqrt{x_d^2 + y_d^2 + D^2} + D} x_d$$

$$y_g = \frac{D}{-\sqrt{x_d^2 + y_d^2 + D^2} + D} y_d \qquad (附\text{-}2)$$

图附-7　透射法中劳埃斑 P 与晶面法线 N 之间的关系

同时可以用心射投影坐标表示衍射斑坐标，有：

$$x_d = \frac{2D^2}{D^2 - x_g^2 - y_g^2}\, x_g$$

$$y_d = \frac{2D^2}{D^2 - x_g^2 - y_g^2}\, y_g \qquad (附\text{-}3)$$

某晶面的极射投影与心射投影之间的坐标关系可以由图附-8获得。其中 R 是极射投影中基圆的半径，D 与前面意义相同，极射投影点 S 的坐标记为 x_s, y_s。于是有：

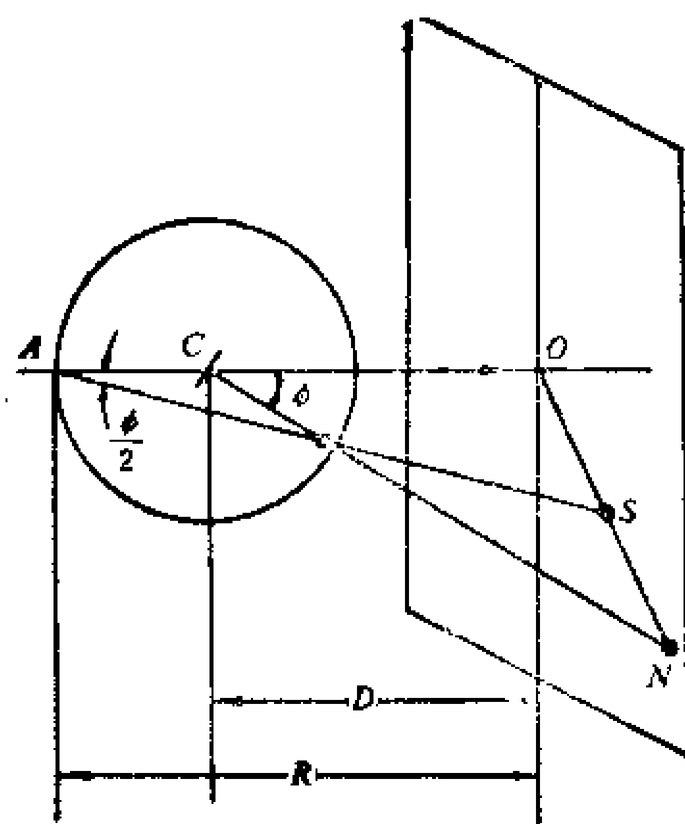
$$\frac{x_s}{x_g} = \frac{OS}{ON} = \frac{R}{ON}\,\mathrm{tg}\,\frac{\phi}{2} = \frac{R}{ON}\,\frac{\sin\phi}{1+\cos\phi}$$

$$= \frac{R}{ON}\,\frac{ON}{CN}\Big/\left(1 + \frac{CO}{CN}\right) = \frac{R}{CN + CO}$$

$$x_s = \frac{R}{D + \sqrt{x_g^2 + y_g^2 + D^2}}\, x_g \qquad (附\text{-}4)$$

$$y_r = \frac{R}{D + \sqrt{x_g^2 + y_g^2 + D^2}} y_g$$

于是利用(附-1)—(附-4)式，可以利用坐标纸把劳埃照片转化成心射投影或极射投影，也可以把极射投影或心射投影转化为劳埃照片。自然人们不会用坐标纸来完成这一工作，而是利用计算机来完成。



图附-8 极射投影与心射投影之间的关系

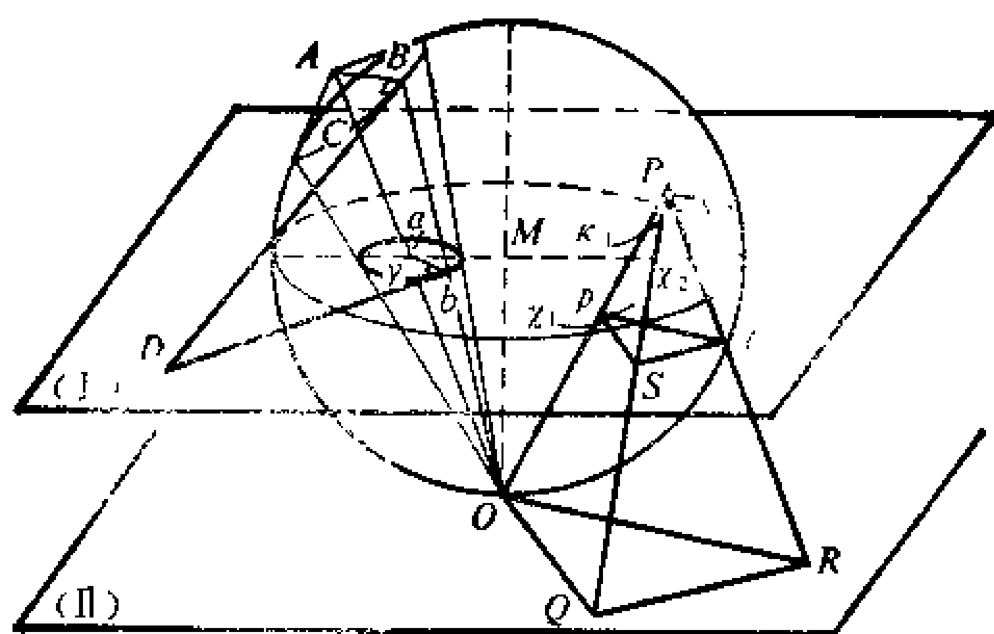
附录三 极射投影中两个基本性质的证明

极射投影有两个相关的基本性质，即：

一、球面上任何两个弧之间的夹角，投影前后保持不变；

二、球面上的大圆或小圆，投影后仍然为圆。

下面将给上述命题以证明：



图附-9　极射投影中的基本性质

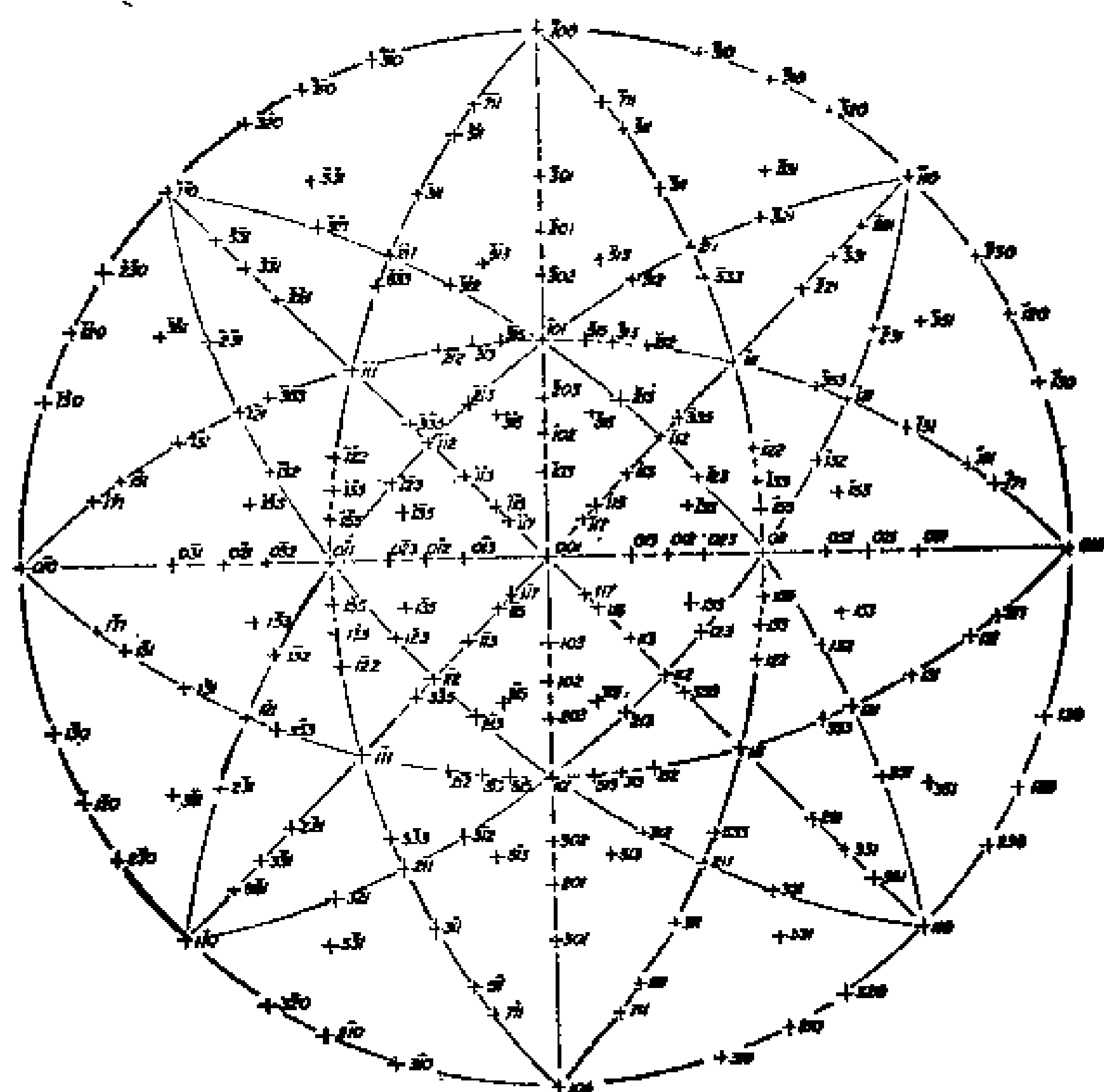
图附-9中参考球心为M，投影光源在O处，图中给出了过参考球心的投影面(Ⅰ)。过O作参考球的切面(Ⅱ)。参考球上任一极点P的极射投影为p。过P点作参考球的两条切线分别与平面(Ⅱ)交于Q、R、则 QO 或 RO 是由O点引出的参考球两条切线。于是 $QO = QP$，$RO = RP$，且 QR 共用，所以 $\triangle QOR \cong \triangle QPR$，即有$\angle QOR = \angle QPR$。由于 pS、pT 分别为 PS、PT 两条直线的极射投影，并且投影面(Ⅰ)平行于平面(Ⅱ)，所以 $\angle SpT = \angle QOR$，即$\angle SpT = \angle SPT$。由此得到的结论是：过球面上任意一点的两条切线的投影的夹角等于切线自身的夹角。考察参考球面上的两条弧 κ_1 与 κ_2，过它们的交点P分别作两弧的切线为 PQ 与 PR。而两弧之间的夹角是由过交点的切线描述的，因此弧 κ_1 与 κ_2 之间的夹角为$\angle SPT$。两弧 κ_1 与 κ_2 的投影为 χ_1 与 χ_2，它们之间夹角为$\angle SpT$。于是基本性质一得以证明。

再考察参考球面上的小圆c，它是以A为顶点的圆锥与参考球面的交线，该圆锥上任一条母线都是此参考球的切线。A的极射投影为a，圆锥上任一条母线 AB 的投影为 ab，小圆 c 的投影为

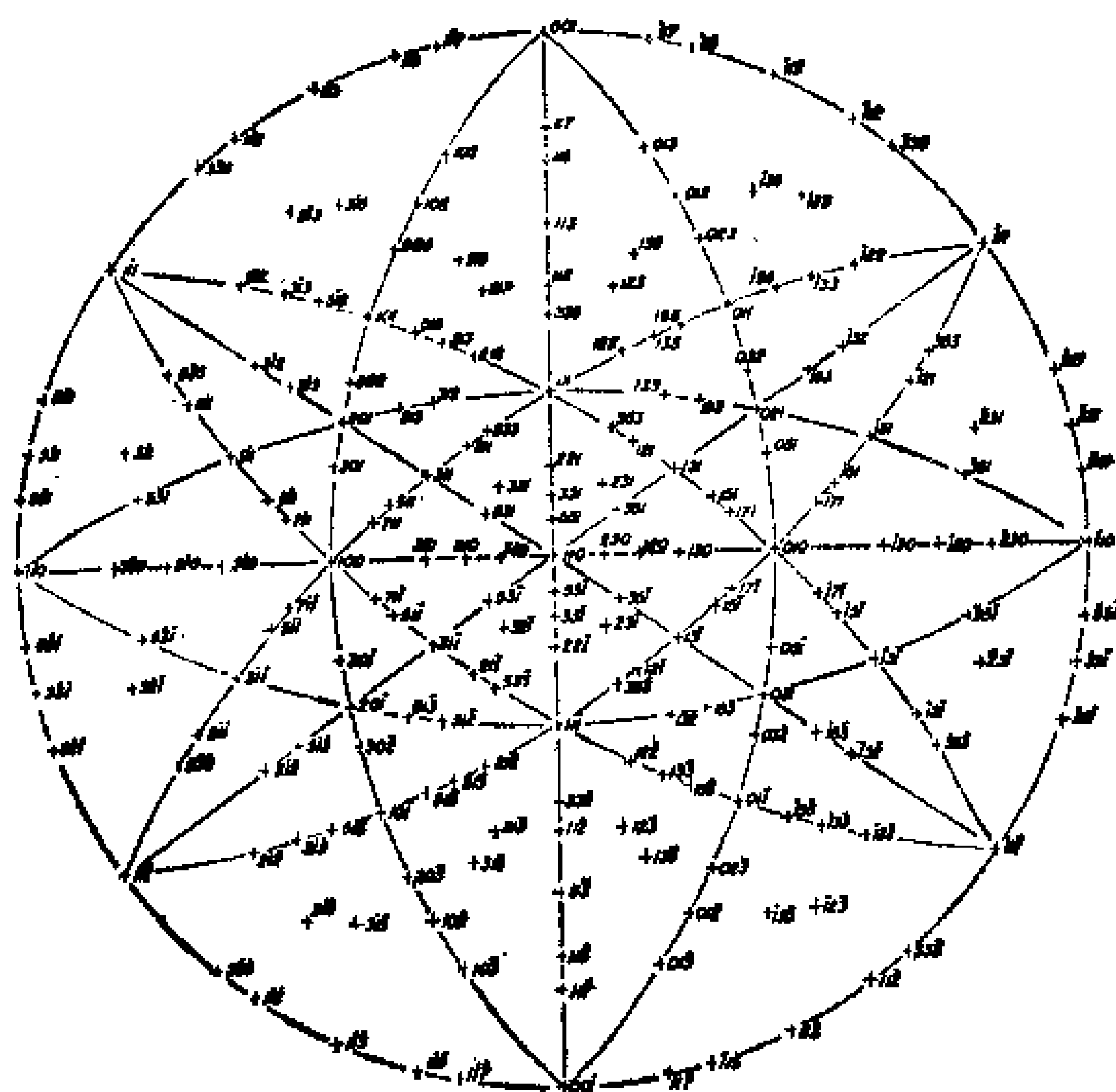
γ. 过 B 点在小圆 c 所在的平面内作参考球的切线，与投影面 (I) 交于 D. BD 的投影为 bD. 由于过 B 点所作的两条切线 BA 与 BD 相互垂直，所以 ab 与 bD 也相互垂直。于是小圆 c 的投影 γ 有这样的性质，即过中心 a 与 γ 上任一点的连线都与过该点与 γ 相切的直线垂直。而有这种属性的曲线为圆，所以参考球上的小圆 c 的投影 γ 也为圆。 应注意的是：圆 γ 的中心 a，并不是参考面上的小圆 c 中心的投影。

由于参考球上的大圆仅是小圆的一种特殊情况，这里就无须再加说明。于是基本性质二得以证明。

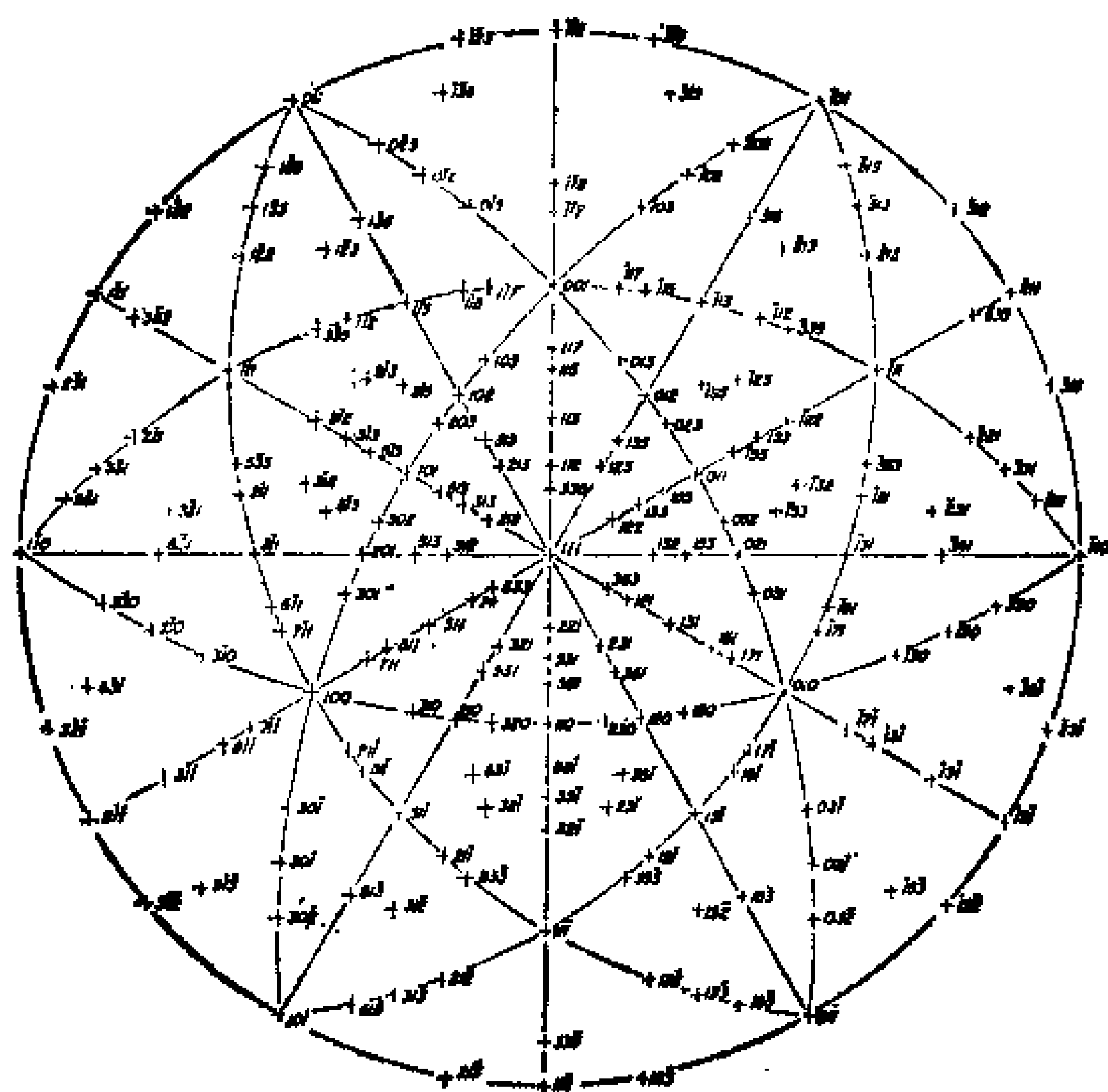
附录四　立方晶系的标准投影



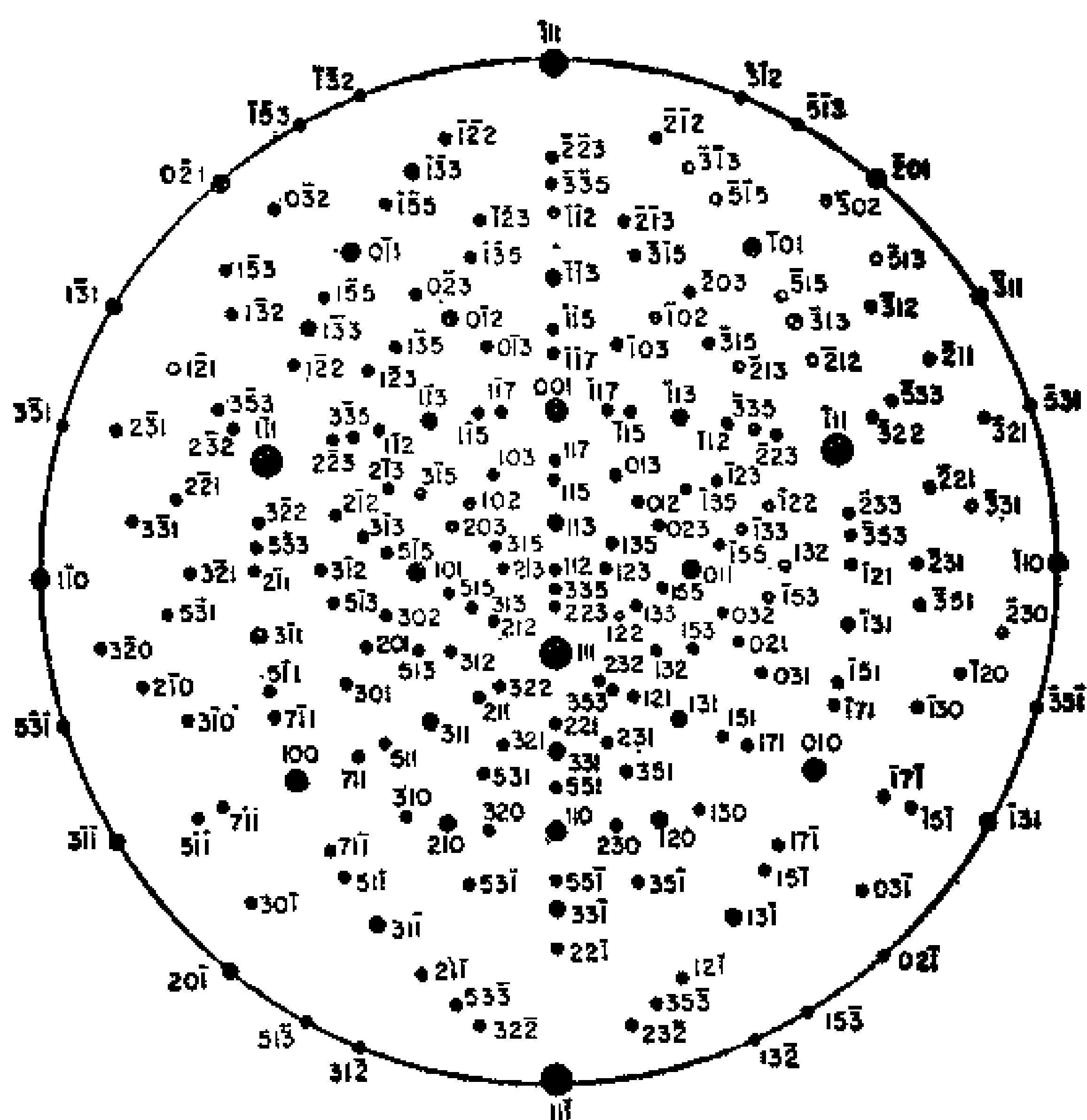
图附-10　立方系 001 标准投影



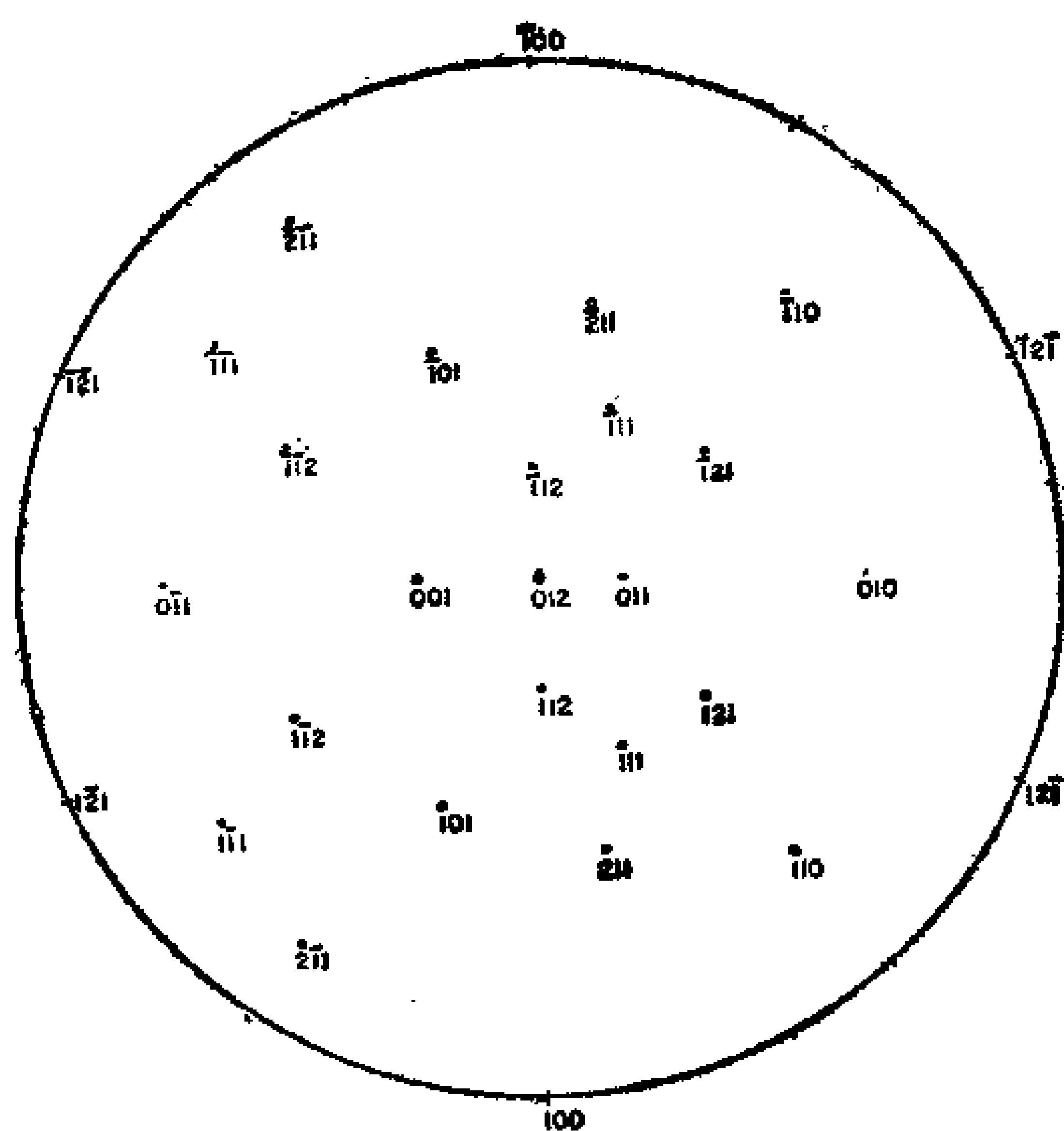
图附-11　立方系110标准投影



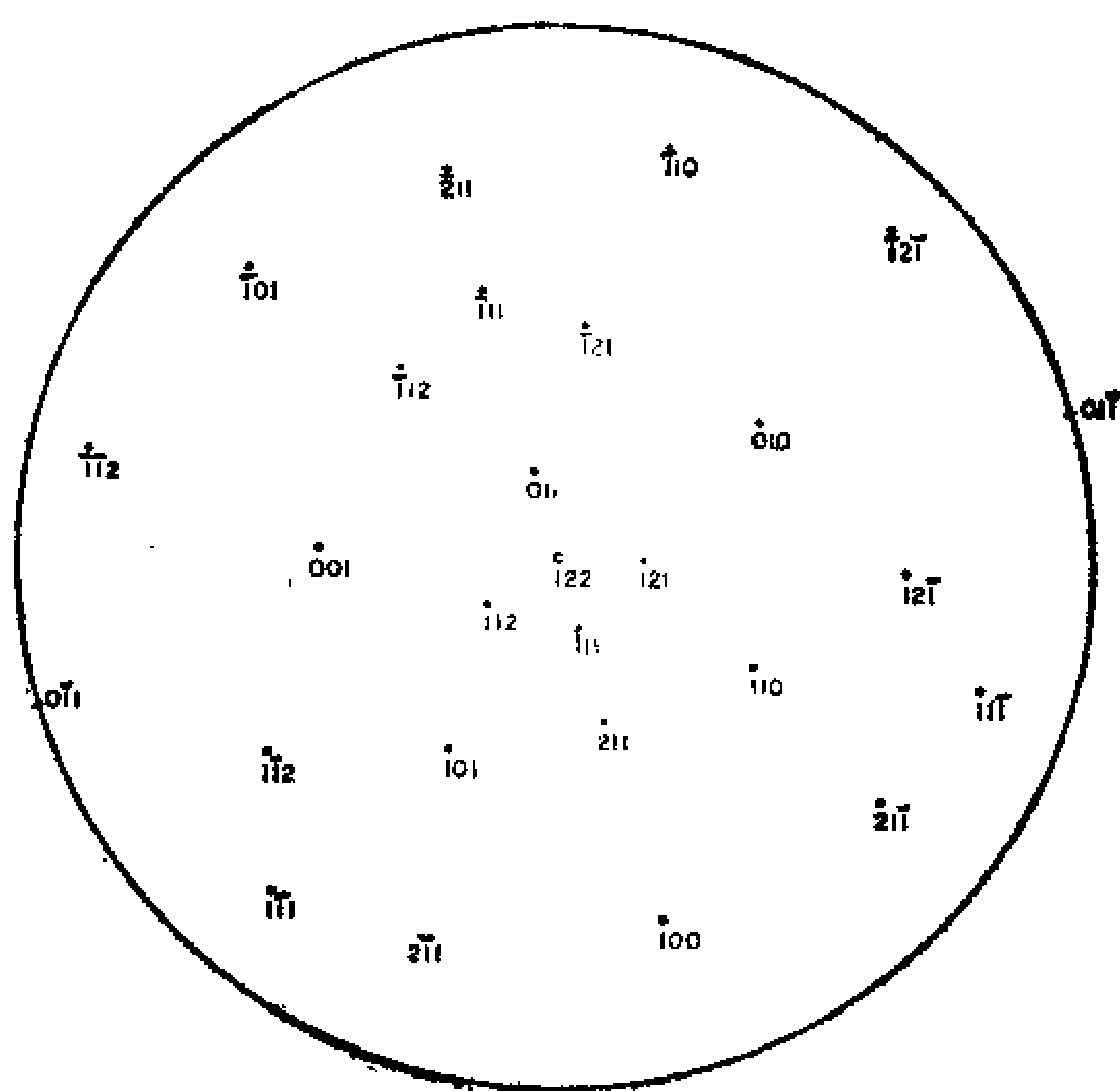
图附-12　立方系 111 标准投影



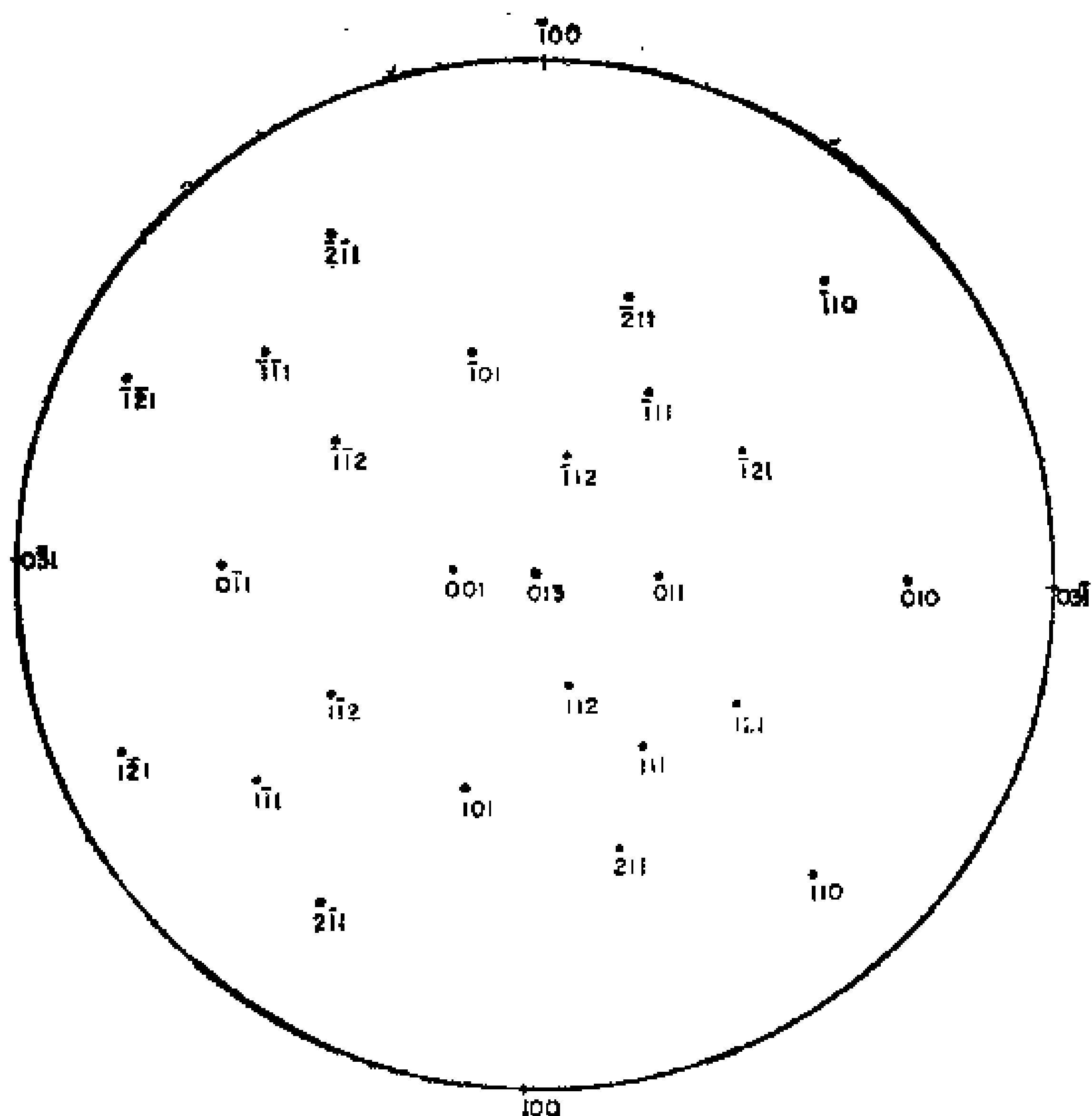
图附-13　立方系112标准投影



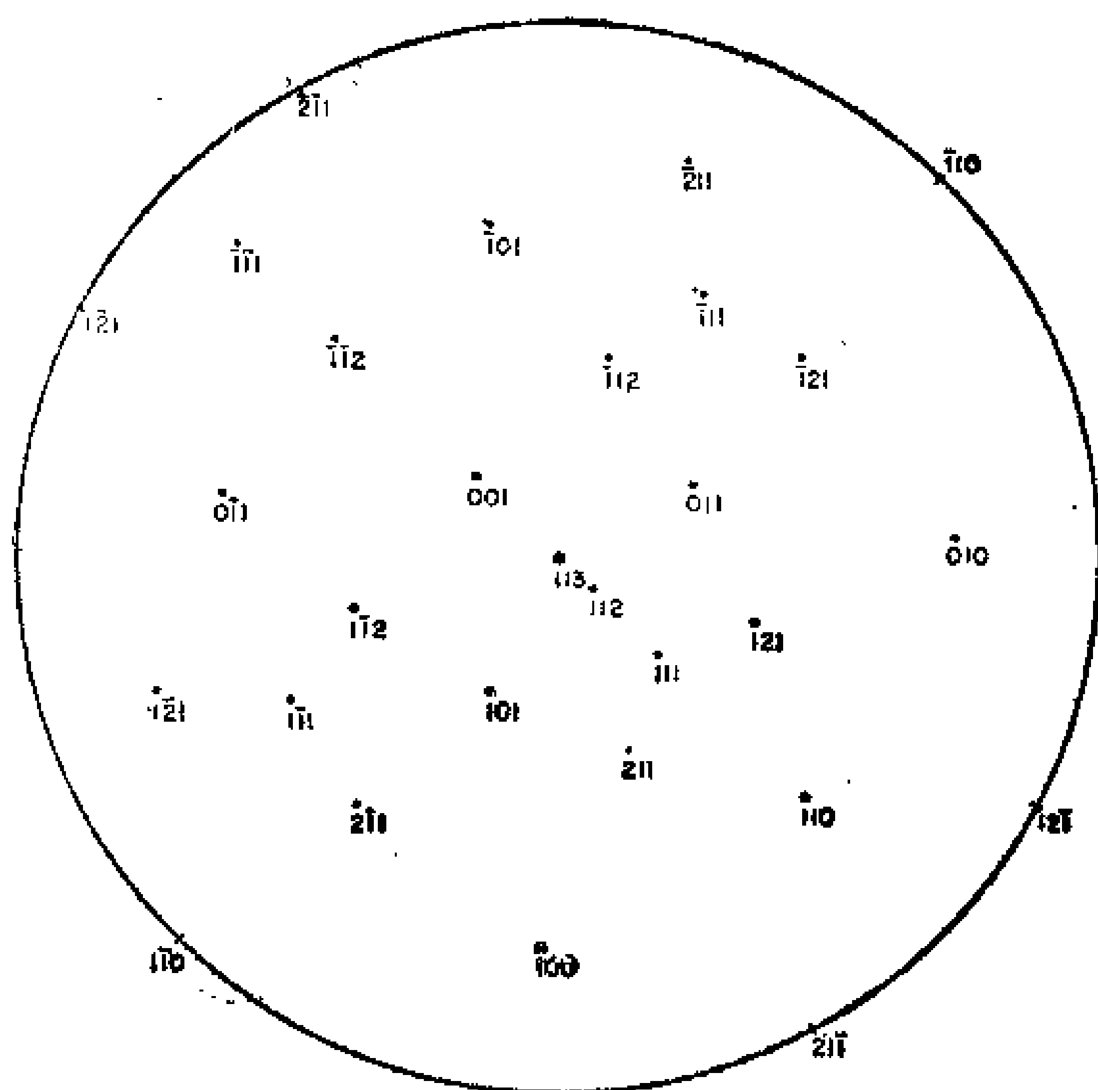
图附-14　立方系 012 标准投影



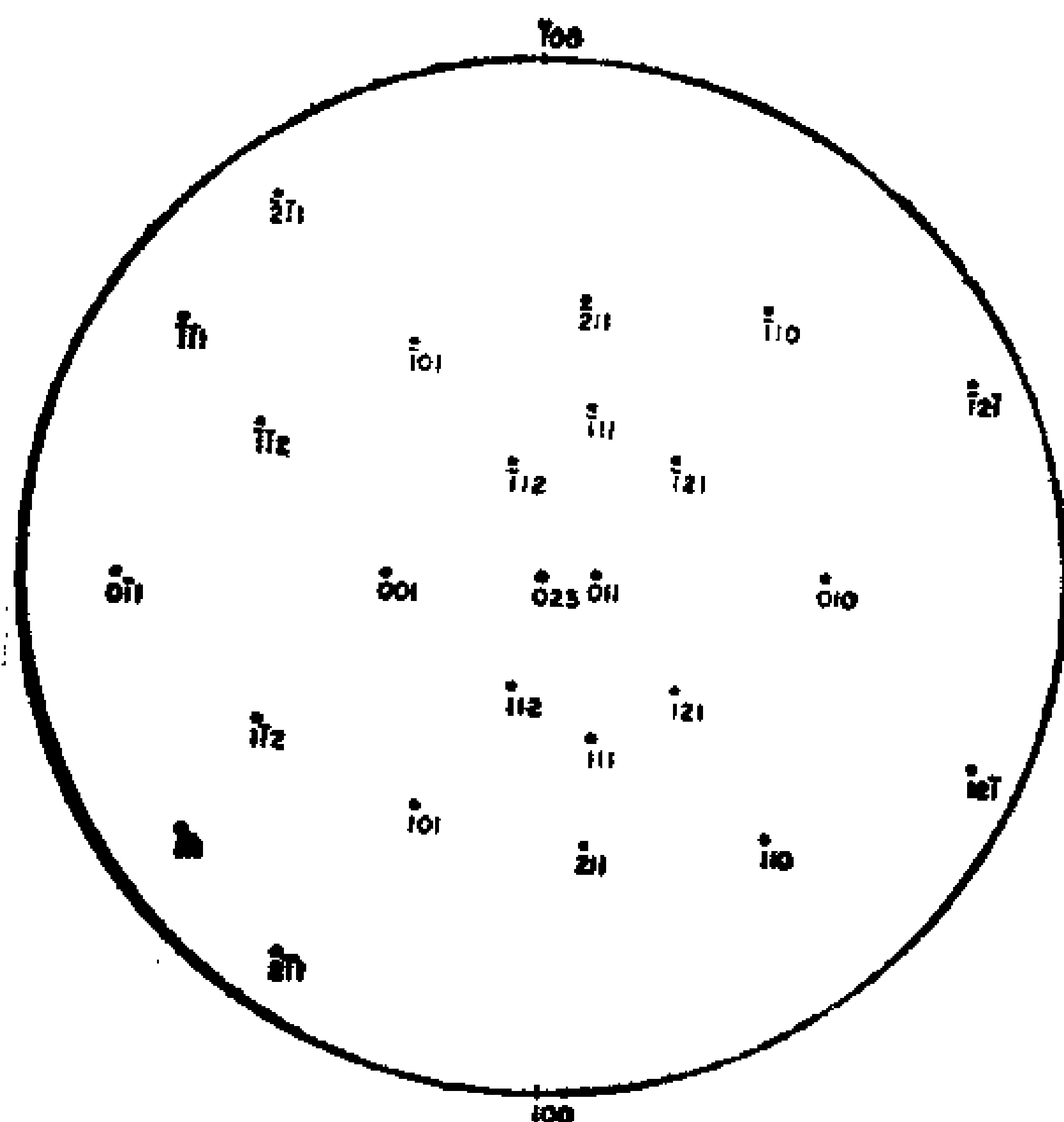
图附-15　立方系122标准投影



图附-16　立方系 013 标准投影



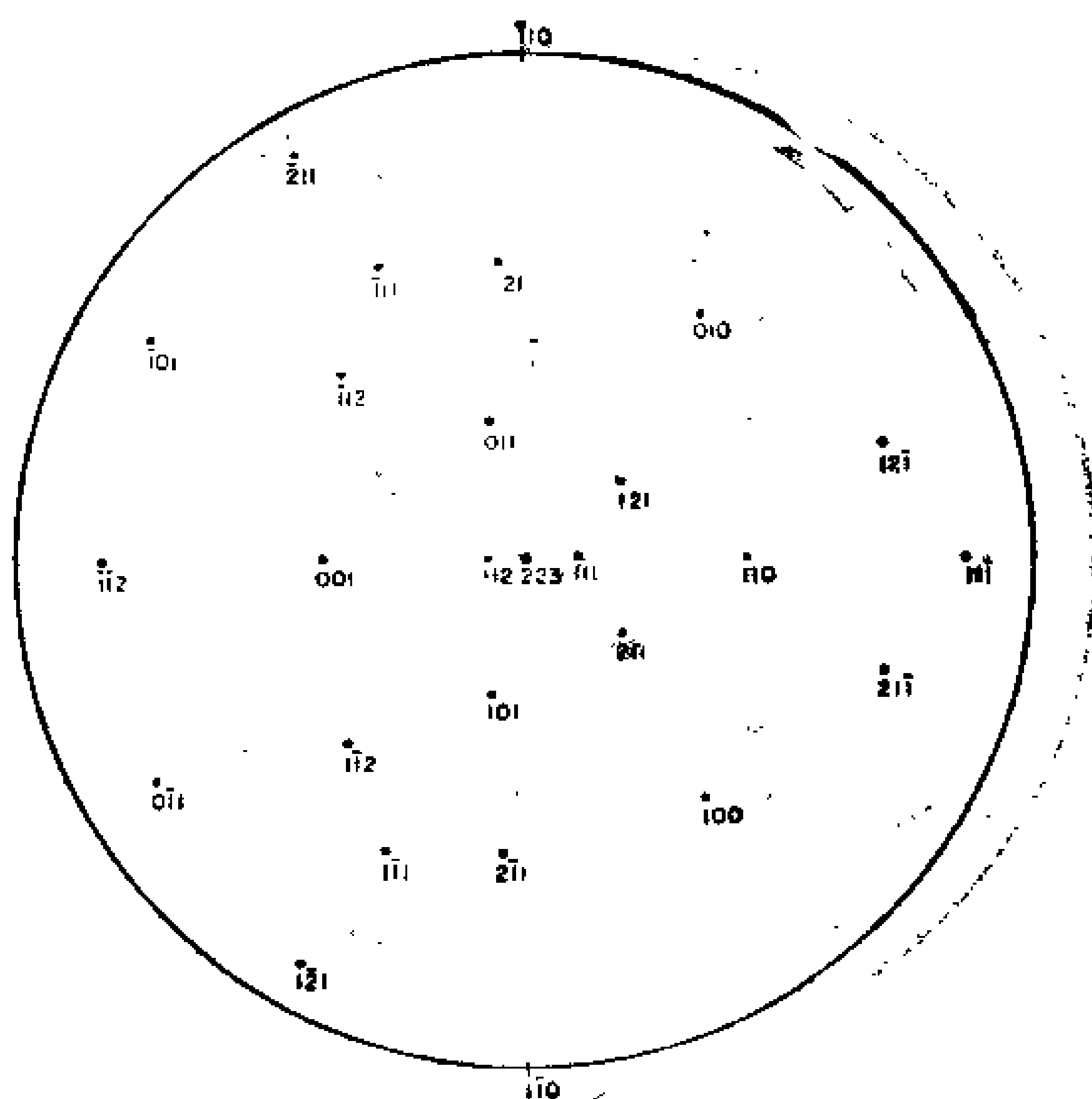
图附-17　立方系 113 标准投影



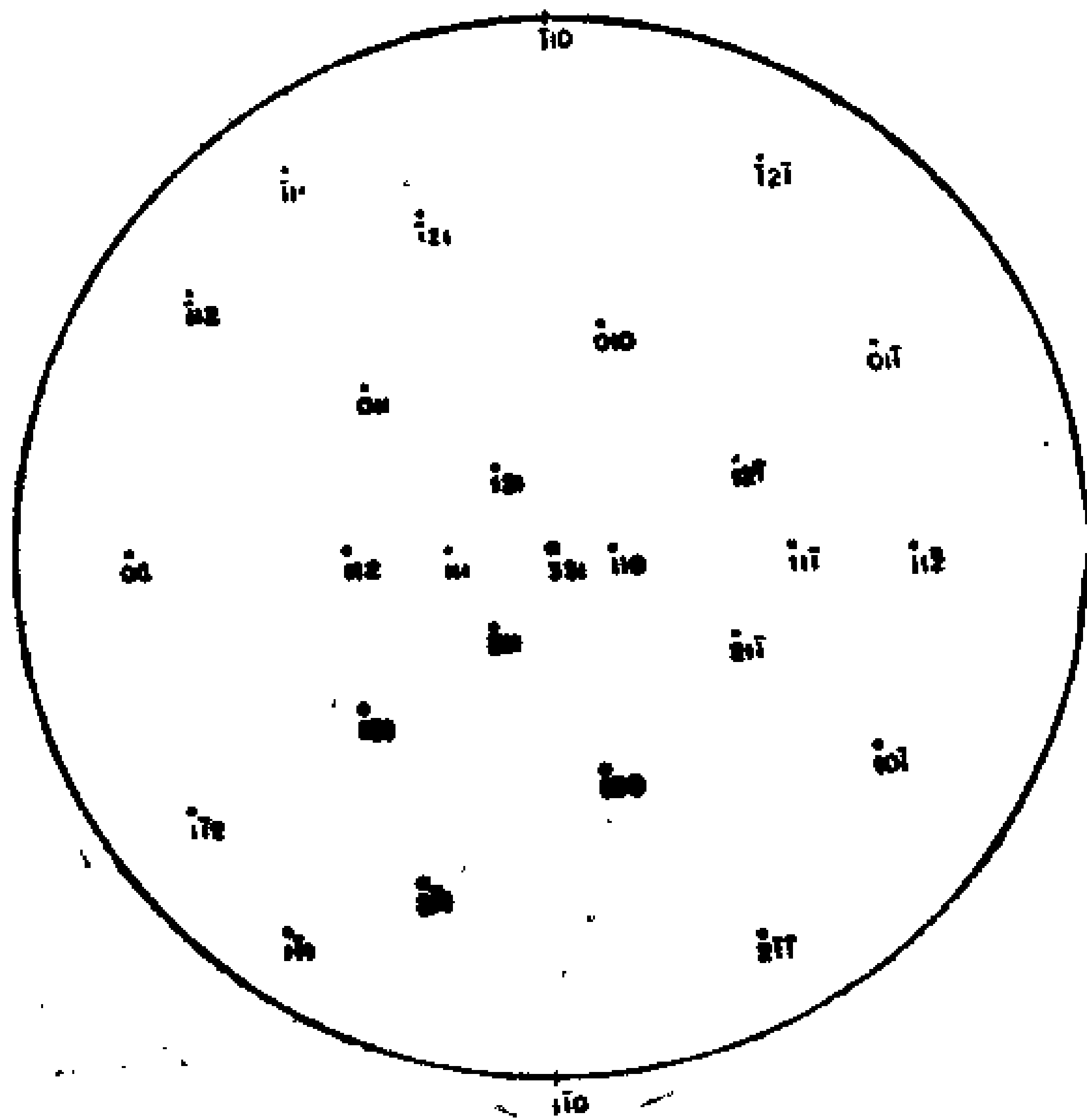
图附-18　立方系 023 标准投影



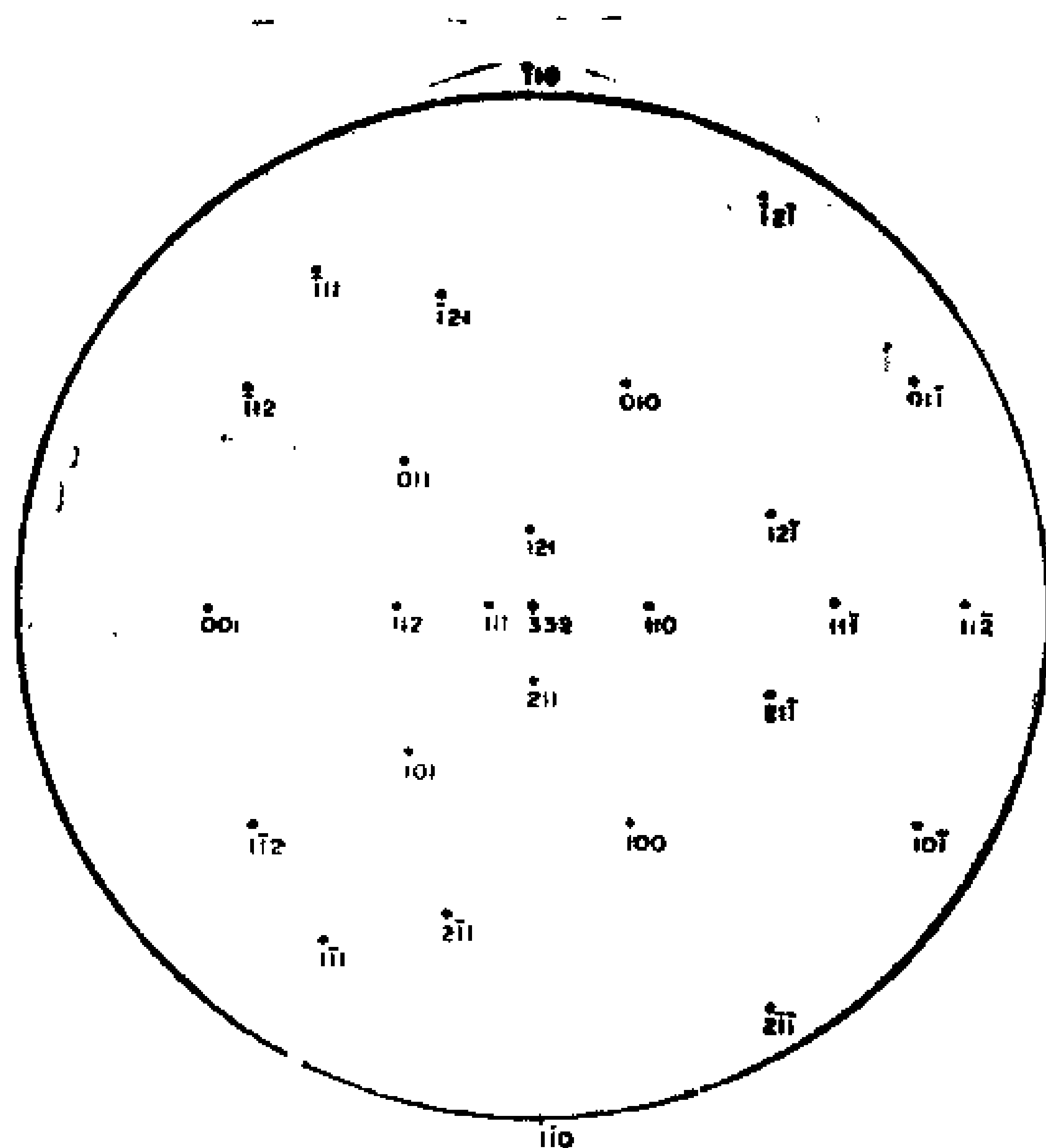
图附-19 立方系123标准投影



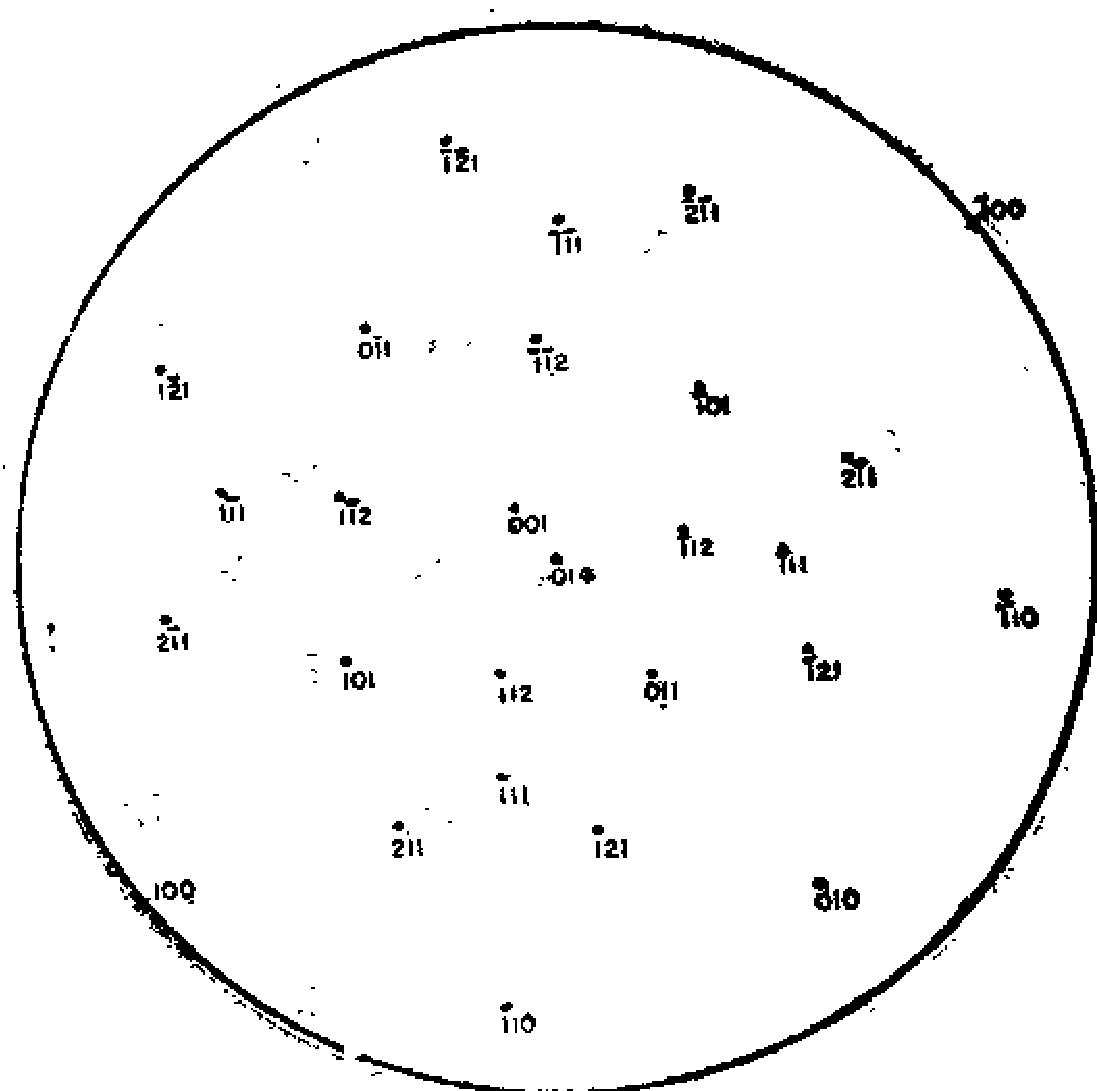
图附-20　立方系 223 标准投影



图附-21 立方系 331 标准投影

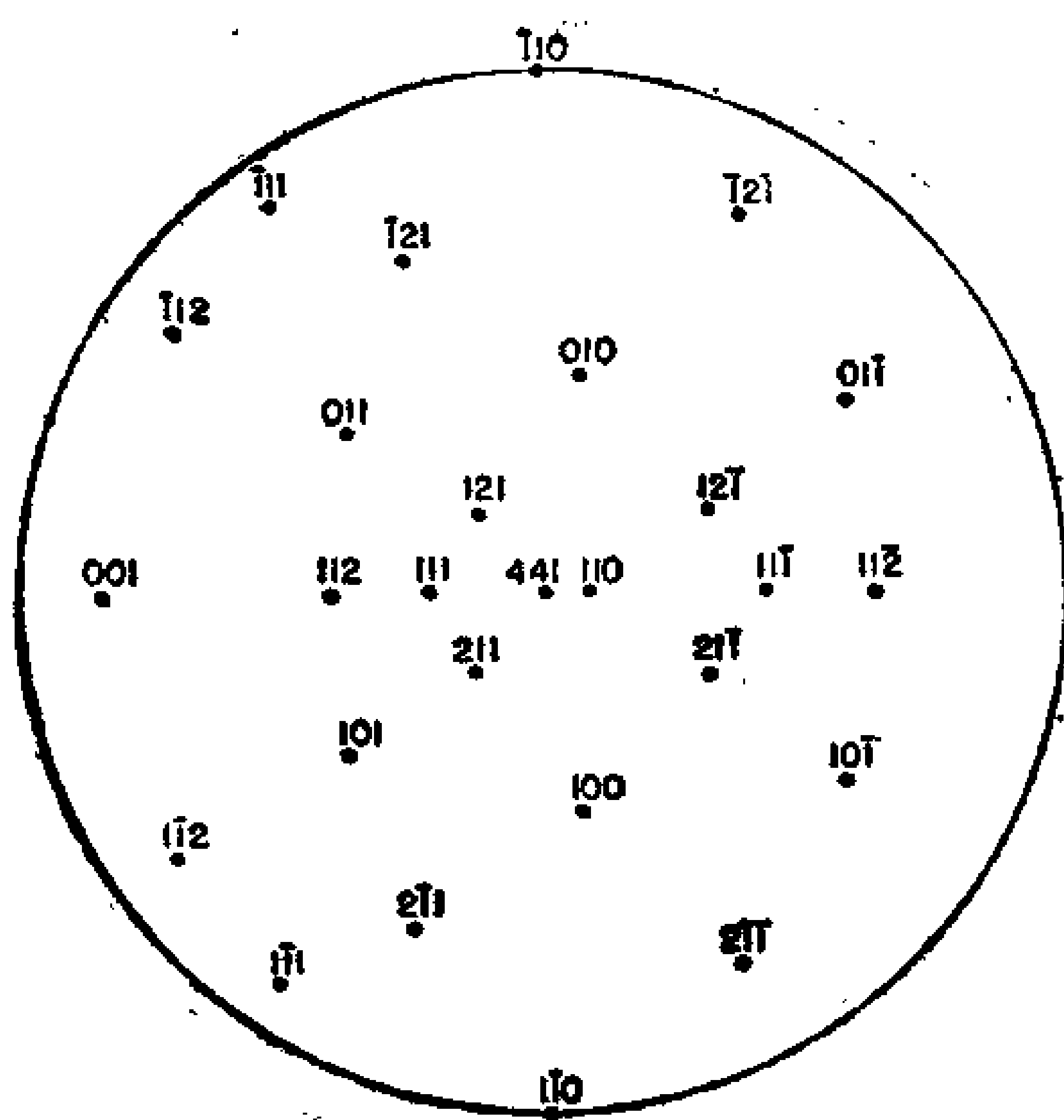


图附-22　立方系 332 标准投影

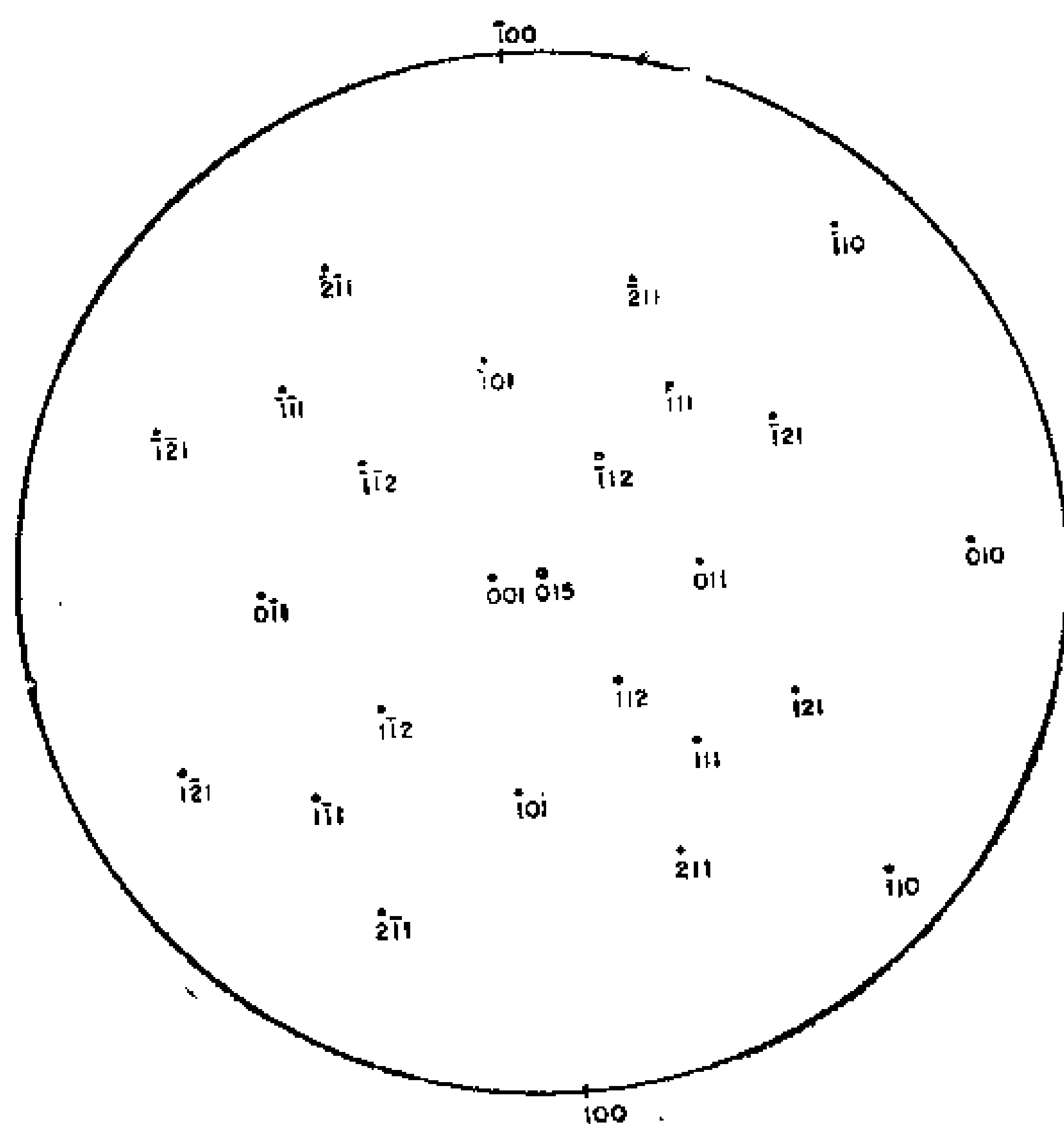


图附-23 立方系014标准投影

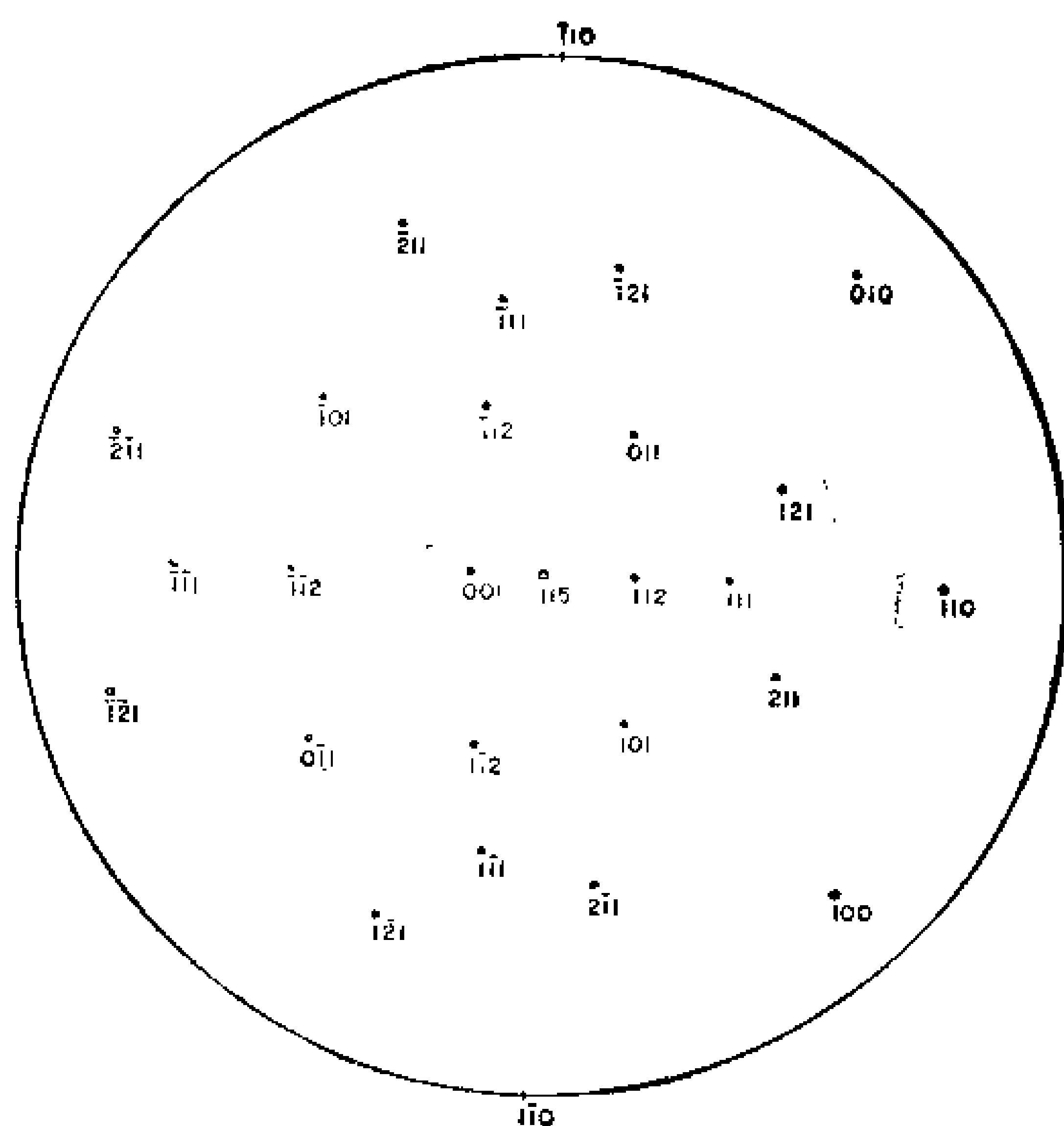
图附-24 立方系 $\bar{1}13$ 标准投影



图附-25　立方系 441 标准投影



图附-26　立方系 015 标准投影



图附-27　立方系115标准投影



图附-28　立方系 551 标准投影

主要参考书

(1) 肖序刚,«晶体结构的几何理论»,人民教育出版社,1960.

(2) 亚沃尔斯基,«倒易晶格空间结构»,地质出版社,1959.

(3) 张孝文、薛万荣、杨兆雄、«固体材料结构基础»,中国建筑工业出版社,1980.

(4) M.J. Berger, Elementary Crystallography, MIT Press, 1978.

(5) O.Johari, G.Thomas, The stereographic Projection and its Application, John Wiley & Sons, 1969.

(6) International Tables for X-ray Crystallography, Vol. 1.

(7) A. Kelly and G.W.Groves,Crystallography and Crystal Defects,Longman, 1970.

(8) A.H.Windbe, A Frist Course in Crystallography, Longman, 1977.

(9) B.K.Vainshtein, V.M.Fridkin and V.L.Indenbom, Modern Crystallography I,II, Springer-Verlag, 1982.

(10) L.W.Codd, Crystallometry, Longmans, 1961.

(11) P.J.Brown and B.J. Forsyth, The Crystal Structure of Solids, Edward Arnold, 1973.

［Ｇｅｎｅｒａｌ Ｉｎｆｏｒｍａｔｉｏｎ］
书名＝晶体学导论
作者＝
页数＝３００
ＳＳ号＝１１０２８６６５
出版日期＝